

Optische Kohärenztomographie mit extrem ultravioletter Strahlung

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades

Doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)



vorgelegt dem Rat der

Physikalisch-Astronomischen Fakultät
der Friedrich-Schiller-Universität Jena

von Dipl.-Phys. Silvio Fuchs

geboren am 07.04.1987 in Mühlhausen/Thür.

Gutachter

1. *Prof. Dr. Gerhard G. Paulus*
Institut für Optik und Quantenelektronik
Friedrich-Schiller-Universität Jena
2. *Prof. Dr. Rainer A. Leitgeb*
Zentrum für Medizinische Physik und Biomedizinische Technik
Medizinische Universität Wien
3. *Prof. Dr. Richard Kowarschik*
Institut für Angewandte Optik
Friedrich-Schiller-Universität Jena

Tag der Disputation: 13. November 2018

„Mikroskope und Fernrohre verwirren eigentlich den reinen Menscheninn.“

Johann Wolfgang von Goethe
aus Wilhelm Meisters Wanderjahre II, Betrachtungen im Sinne der Wanderer

„Where the telescope ends the microscope begins,
and who can say which has the wider vision?“

Victor Hugo
aus Les Misérables

Abstract

In this thesis, the concept and the realization of laboratory-based optical coherence tomography in the extreme ultraviolet (XUV) spectral range is presented. XUV coherence tomography (XCT) is a three-dimensional imaging technique with an axial resolution down to a few nanometer [1]. A theoretical XCT model has been developed for the reconstruction of the sample structure, which includes the interaction between the XUV light and the sample. It is valid for absorbing samples illuminated under arbitrary angles of incidence and thus extends a common model of optical coherence tomography (OCT) [2, 3]. As the information about the absorption and dispersion of the sample is contained in the XCT model, an additional reconstruction of material properties of the sample will be enabled.

The demonstration of laboratory-based XCT, which before has only been implemented at synchrotron facilities, was a major goal of this thesis. Using high harmonic generation (HHG) [4] of a femtosecond infrared laser pulse, a broadband laboratory-based XUV source with sufficient photon flux ($\approx 0,2 \text{ nW/eV}$ over the full bandwidth) in the so-called silicon transmission window between 30 eV – 100 eV was realized [5]. A revised XCT microscope has been designed, constructed and adapted to the new laser-based XUV source, which routinely facilitates XCT measurements in the laboratory [6]. The microscope is a three meter long vacuum beamline consisting of XUV source, focusing mirror, and sample chamber.

A comparison between laser-based and synchrotron-based measurements shows good agreement. With laser-based XCT, an axial resolution of $\approx 30 \text{ nm}^1$ has been achieved. This is comparable to the achieved synchrotron-based axial resolution of $\approx 20 \text{ nm}$ [7]. Accordingly, the axial resolution of XCT is 2-3 orders of magnitude higher than in conventional OCT [8].

Unlike conventional OCT, the realized XCT setup does not use a beamsplitter for the generation of a reference wave. Instead, the surface of the sample serves as a reference. Therefore, the interferometric stability is intrinsically achieved and simplifies the experimental setup significantly. However, such a setup has the disadvantage that the reconstruction is ambiguous, since autocorrelation artifacts appear. A non-ambiguous reconstruction of the axial structure was so far not possible [1, 7]. In this thesis, a novel one-dimensional phase-retrieval algorithm is presented, which is able to remove the artifacts from the signal and allows a non-ambiguous reconstruction of the structure. Three-dimensional structured silicon-based samples have been investigated and processed with the new algorithm, which is referred to as PR-XCT [6]. With the removal of artifacts

¹Besides the spectral bandwidth the resolution depends on the applied Fourier window to suppress artifacts.

and thus the possibility to use XCT on samples, whose inner structure is unknown before the measurement, a further goal of this thesis was achieved.

In fact, during laser-based PR-XCT measurements, an unexpected nanometer-thin layer was found inside the sample, which was not intentionally planned in the production process. The existence of this layer and thus the XCT measurement could only be confirmed by a transmission electron microscope. To this end, a thin slice was cut out of the sample, which was thus destroyed. The resolution of a scanning electron microscope was not high enough to resolve the layer. Later it turned out, that the vacuum chamber was vented for a short amount of time during the production process and a 1-2 nm layer of SiO₂ was formed. Hereby, a striking advantage of XUV microscopy becomes apparent. Lighter elements like oxygen produce a high contrast in the XUV albeit they are almost indistinguishable from surrounding light elements like silicon in an electron microscope.

In this work, XCT is realized using optics with low numerical aperture (NA) since the fabrication of high NA optics in the XUV is technically extremely demanding. Therefore, the lateral resolution of the laboratory-based XCT setup is limited to approximately 23 μm [6]. At least, the lateral resolution has been improved by a factor of 10 compared to the synchrotron-based measurements [7]. However, the axial resolution of XCT is still orders of magnitudes better than the lateral resolution. Even with this technical limitation of the current XCT setup, several applications are within reach, e.g., three-dimensional investigation of (multilayer-)coatings of optical mirrors or even XUV-mirrors, axial structured devices like solar cells or axial-structured semiconductor devices like graphene-based electronics. In addition, imaging of laterally homogeneous biological membranes might be possible. XCT with high numerical aperture and thus high lateral resolution could even have further applications, e.g., non-destructive three-dimensional imaging of semiconductor devices, lithographic masks, and biological structures. A combination of XCT with lensless imaging techniques like „Coherent Diffraction Imaging“ [9] or Ptychography [10] might be a promising approach to improve the lateral resolution of XCT. Furthermore, the intrinsic time resolution of the HHG source in the range of femto- or even attoseconds [11] may allow time-resolved imaging of ultrafast processes in solids [12].

Inhaltsverzeichnis

Abstract	I
Inhaltsverzeichnis	III
1 Einleitung	1
1.1 Gliederung der Arbeit und Forschungstätigkeit	3
2 Einführung in die XUV-Mikroskopie	5
2.1 XUV-Mikroskopie im Vergleich zu anderen hochauflösenden Methoden .	6
2.2 Mikroskopiemethoden im XUV	8
3 Grundlagen	11
3.1 Ausbreitung elektromagnetischer Wellen	11
3.1.1 Helmholtz-Gleichung	11
3.1.2 Homogene Medien	12
3.1.3 Stückweise homogene Medien - verallgemeinerte Fresnel'sche Formeln	13
3.2 Statistische Optik	17
3.2.1 Optische Intensität	17
3.2.2 Autokorrelation und zeitliche Kohärenz	18
3.2.3 Spektrum	19
3.2.4 Wiener-Khinchin-Theorem	20
3.3 Das Michelson-Interferometer	20
3.3.1 Intensitätssignal in Abhängigkeit der Armlängen	20
3.3.2 Das Spektrum am Interferometerausgang	23
3.4 Optische Kohärenztomographie - OCT	25
3.4.1 OCT im Frequenzbereich	27
3.4.2 OCT im Zeitbereich	30
3.4.3 Laterale Abbildung	32
3.4.4 Auflösung	32
3.5 Strahlungsquellen im extrem ultravioletten Spektralbereich	33
3.5.1 Synchrotron-Quellen	34
3.5.2 Erzeugung hoher Harmonischer	34
4 OCT im extrem ultravioletten Spektralbereich - XCT	38
4.1 Konzept von XCT	39
4.2 XCT-Modell	42
4.3 Rekonstruktion der axialen Struktur bei XCT	46
4.3.1 Referenzmessung und Entfaltung vom Quellspektrum	47
4.3.2 XCT-Rekonstruktion an simuliertem Beispiel	49
4.4 Signalverarbeitung und Diskretisierung	50
4.5 Synchrotronbasierte XCT	52
5 Lasergetriebene XUV Kohärenztomographie	54

5.1	Lasergetriebene XUV-Strahlungsquelle für XCT	54
5.1.1	Laserinduzierte Plasmen	54
5.1.2	Erzeugung hoher Harmonischer	55
5.1.3	Anpassung einer HHG-Quelle für XCT	56
5.2	Erste laserbasierte XCT-Messungen	58
6	Artefaktfreie XCT	63
6.1	Eindeutige XCT-Rekonstruktion	64
6.1.1	Eindimensionale Phasenrekonstruktion - PR-XCT	67
6.2	PR-XCT mit gemessenen Daten	75
6.2.1	Entfaltung der spektralen PSF des Spektrometers	76
6.2.2	Eindeutige Rekonstruktion	78
6.2.3	Vergleich von PR-XCT mit verschiedenen XUV-Quellen	80
6.3	Laserbasierte PR-XCT an lateral strukturierter Probe	81
6.4	Zusammenfassung Phasenrekonstruktion	85
7	Entwicklung und Aufbau eines laserbasierten XCT-Mikroskops	86
7.1	XCT-Mikroskop	86
7.2	Modulares XUV-Spektrometer	88
7.3	PR-XCT mit fertiggestelltem XCT-Mikroskop	89
8	Ausblick	92
8.1	XCT mit Referenzmembran	92
8.2	Verkürzung der Messdauer von XCT	93
8.3	Verbesserung der lateralen Auflösung	94
8.3.1	XUV-Schwarzschild-Objektiv	94
8.3.2	Kombination von XCT und CDI	95
8.4	XCT mit Materialkontrast	95
8.5	XCT im Wasserfenster	96
8.6	Zeitaufgelöste XCT	96
9	Zusammenfassung	97
	Danksagung	99
	Literaturverzeichnis	101
	ANHANG	112
	A Rechnungen und Beweise	112
	B Zusätzliche Abbildungen	117
	Abbildungsverzeichnis	122
	Eigene Publikationen	124
	Ehrenwörtliche Erklärung	127

1 Einleitung

Der Mensch nimmt einen Großteil der Informationen über seine Umwelt visuell wahr. So ist es nicht verwunderlich, dass das Sehen bei der Erforschung der Natur und dem Verständnis ihrer Prozesse und Gesetzmäßigkeiten von überragender Bedeutung war und ist. Optische Geräte, welche die Grenzen des „Sichtbaren“ stetig erweitern, sind daher schon immer ein Schlüssel für den Erkenntnisgewinn in den Naturwissenschaften.

Die Erfindung des Mikroskops im frühen 17. Jahrhundert veränderte die Biologie und Medizin grundlegend. Strukturen und Vorgänge auf Skalen, die vorher nicht zugänglich waren, konnten nun sichtbar gemacht und damit verstanden werden. Der Trend, immer kleinere Details des Mikrokosmos zu visualisieren, ist bis heute ungebrochen. Im 20. Jahrhundert, mit Erscheinen des Lasers [13, 14], sind mit der Entwicklung von Fluoreszenz- und scannender Mikroskopie [15–19] enorme Fortschritte hinsichtlich der Auflösung und der Geschwindigkeit erzielt worden. Die Entwicklung des Elektronenmikroskops [20] ermöglichte Einblicke auf atomaren Skalen. Der Präparationsaufwand der Proben für diese hoch speziellen Mikroskope ist jedoch groß. Deshalb ist die nichtinvasive und zerstörungsfreie „konventionelle“ Lichtmikroskopie auch aufgrund ihrer hohen Verfügbarkeit noch immer die wohl meist verwendete Mikroskopiemethode. Die grundlegende Auflösungsgrenze der konventionellen Lichtmikroskopie wurde im späten 19. Jahrhundert von Ernst Abbe formuliert [21]:

$$d = \frac{\lambda}{2n \sin \alpha} = \frac{\lambda}{2\text{NA}}. \quad (1.1)$$

Dabei ist d der Abstand zweier Punkte, die gerade noch voneinander getrennt aufgelöst werden, λ die Wellenlänge des Lichtes und $n \sin \alpha$ die numerische Apertur (NA) des verwendeten Objektivs. Die erreichbare Auflösung ist also fundamental an die Wellenlänge des Lichtes gekoppelt.

Mit sogenannter extrem ultravioletter Strahlung (XUV) im Wellenlängenbereich von etwa 2 – 40 nm können so prinzipiell nanoskalige Auflösungen erreicht werden [22]. Mikroskopie mit XUV-Strahlung hat aber noch einen weiteren Vorteil: In diesem Spektralbereich sind die Absorptionsquerschnitte der meisten Materialien sehr hoch, sodass einzigartige Materialkontraste für die Bildgebung ausgenutzt werden können. Beispielsweise ist der hohe Absorptionskontrast zwischen Kohlenstoff und Wasser bei der Bildgebung biologischer Strukturen mit XUV-Strahlung bzw. weicher Röntgenstrahlung außerordentlich vorteilhaft [23, 24].

Die Realisierung von XUV-Mikroskopie ist allerdings sehr aufwendig, da sowohl die Erzeugung der Strahlung als auch die Herstellung geeigneter optischer Elemente aufgrund der kurzen Wellenlänge und der hohen Absorption [25] technologisch herausfordernd sind.

Durch die Bestrebungen in der Halbleiterindustrie, XUV-Strahlung für die Lithographie nutzbar zu machen [26, 27], ist jedoch die Verfügbarkeit von XUV-Optiken in den letzten Jahren enorm gestiegen. Zusätzlich wird durch die nun notwendige Inspektion der lithographischen Masken, die mit derselben Strahlung erfolgen muss wie der Belichtungsprozess, eine völlig neue Anwendung für die XUV-Mikroskopie erschlossen [28]. Auch bei der laborbasierten Erzeugung der XUV-Strahlung wurden in den letzten Jahrzehnten mit Laserplasmen [22, 29, 30] oder der Erzeugung hoher Harmonischer von infraroter Laserstrahlung [4] große Fortschritte erzielt. So können mit laborbasierten XUV-Quellen Photonenflüsse erreicht werden, die vorher nur mit Großforschungsanlagen wie z.B. Synchrotrons erzeugt werden konnten [31]. Aufgrund der genannten Entwicklungen wächst das Feld der XUV-Mikroskopie, insbesondere der laborbasierten Verfahren, zunehmend [32–37].

Laserbasierte XUV-Quellen geben ihre Strahlung typischerweise in einem sehr breiten Spektralbereich ab [22]. Die meisten existierenden Mikroskopieverfahren wurden jedoch für monochromatische Strahlung an Synchrotrons entwickelt. Überträgt man diese Verfahren auf Laborquellen, geht ein Großteil des aufwendig erzeugten Photonenflusses für die Bildgebung verloren. Für den Einsatz an laserbasierten Quellen sind polychromatische Verfahren daher wesentlich besser geeignet. Die Fokussierung von breitbandiger XUV-Strahlung mit hoher NA ist trotz der Entwicklungen der Halbleiterindustrie, die überwiegend auf monochromatische Techniken setzt, weiterhin sehr aufwendig und teuer. Mit begrenzter NA sinkt aber die erreichbare Auflösung (siehe Gl. 1.1). Es müssen also polychromatische Verfahren entwickelt werden, die trotz der geringen verfügbaren NA hohe Auflösungen erlauben. Ziel dieser Arbeit ist es deshalb, die im Infrarotbereich seit etwa 30 Jahren insbesondere in der Ophthalmologie (Augenheilkunde) etablierte optische Kohärenztomographie (OCT) [2] in den XUV-Bereich zu übertragen und sie an laborbasierten XUV-Quellen zu ermöglichen. OCT ist eine zerstörungsfreie dreidimensionale Tomographiemethode, deren axiale Auflösung (Tiefenauflösung) nicht wie bei der herkömmlichen Mikroskopie von der numerischen Apertur des Objektivs, sondern nur von der Kohärenzlänge der verwendeten Strahlung abhängt [3, S.24ff]:

$$d_{\text{axial}}^{\text{OCT}} \approx 0,44 \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda}. \quad (1.2)$$

Dabei ist λ die Zentralwellenlänge und $\Delta\lambda$ die Bandbreite der verwendeten Lichtquelle. Trotz kleiner numerischer Aperturen können so bei entsprechenden Bandbreiten im XUV nanoskalige axiale Auflösungen erreicht werden. Die neue Methode wird extrem ultraviolette Kohärenztomographie oder kurz XCT genannt und ist bestens für die Verwendung mit laborbasierten XUV-Quellen geeignet, da sie den zur Verfügung stehenden breitbandigen Photonenfluss effizient für eine hohe axiale Auflösung nutzt. Die Anwendungspotentiale

von XCT erstrecken sich von der zerstörungsfreien dreidimensionalen Abbildung silizium-basierter Halbleiterstrukturen über die Untersuchung von Mehrlagenschichtsystemen wie Spiegel oder lithographische Masken bis hin zur Bildgebung biologischer Strukturen.

1.1 Gliederung der Arbeit und Forschungstätigkeit

Die Doktorarbeit ist wie folgt gegliedert:

- Kapitel 2 beinhaltet eine generelle Einführung in das Feld der XUV-Mikroskopie sowie einen Vergleich zu anderen Mikroskopiemethoden mit ähnlich hoher Auflösung. Es werden verschiedene XUV-Mikroskopiemethoden vorgestellt.
- In Kapitel 3 werden die für das Verständnis von laserbasierter XCT notwendigen physikalischen Grundlagen beschrieben. Nach der Einführung der Lösung der Helmholtz-Gleichung durch die sog. Matrixmethode werden die statistische Optik sowie das Michelsoninterferometer ausführlich behandelt. Danach werden die Zusammenhänge der optischen Kohärenztomographie hergeleitet und schließlich eine kurze Einführung in die Erzeugung von XUV-Strahlung gegeben.
- In Kapitel 4 werden die Besonderheiten und Herausforderungen von optischer Kohärenztomographie im XUV-Bereich beschrieben. Aus der Matrixmethode wird ein XCT-Modell für die Wechselwirkung des XUV-Lichtes mit der Probe unter Beachtung der Absorption und schräger Einfallswinkel hergeleitet. Dies lässt sich auf das oft verwendete OCT-Modell einzelner isolierter Reflektoren überführen und ermöglicht so die Rekonstruktion der Tiefenstrukturen mittels Fourier-Transformation. Im Vergleich zur XCT-Modellierung in [1] und [7], wurde das Modell in dieser Arbeit um die Komplexwertigkeit der Reflektivitäten und damit der Absorption der einzelnen Schichten erweitert, die bis dahin nur qualitativ behandelt wurde. Da sowohl Absorption als auch Dispersion im neuen Modell enthalten sind, bildet es die Basis für die zukünftige Realisierung materialaufgelöster XCT.
- In Kapitel 5 werden die realisierte lasergetriebene XUV-Quelle sowie die ersten laserbasierten XCT-Messungen vorgestellt. Die Ergebnisse werden mit synchrotronbasierten Messungen der gleichen bzw. ähnlichen Proben verglichen.
- In Kapitel 6 wird ausführlich auf das Problem der Mehrdeutigkeitsartefakte bei XCT eingegangen. Das zu Grunde liegende Problem der fehlenden Phaseninformation wird analysiert und ein neuartiger eindimensionaler Phasenrekonstruktionsalgorithmus wird vorgestellt. Schließlich werden die ersten eindeutig rekonstruierten Tomogramme, die mit laserbasierter XCT aufgenommen wurden, gezeigt und analysiert.

- Kapitel 7 beschreibt überblicksartig das neue im Rahmen dieser Arbeit geplante und sukzessiv aufgebaute XCT-Mikroskop und zeigt die ersten mit dem erst am Ende der Doktorarbeit komplett fertiggestellten Aufbau aufgenommenen Datensätze. Die Daten aus den vorigen Kapiteln wurden in verschiedenen Stadien der Entwicklung des XCT-Mikroskops aufgenommen.
- In Kapitel 8 wird ein Ausblick auf die wichtigsten weiterführenden Projekte gegeben, für die diese Arbeit die Grundlage bildet.

Die Idee zur XCT wurde in *G. G. Paulus und C. Rödel „Short Wavelength Coherence Tomography“ (US7656538B2)* [38] im Jahr 2008 erstmals beschrieben und patentiert. Das theoretische Konzept zusammen mit ersten Simulationen [39] ist in *S. Fuchs et al. Applied Physics B - Lasers and Optics (2012)* [1] veröffentlicht. Später wurde die erste experimentelle Demonstration von XCT an einem Synchrotron mit axialen Auflösungen von bis zu 8 nm im Rahmen der Diplomarbeit des Autors [40] umgesetzt und ist in *S. Fuchs et al. Scientific Reports (2016)* [7] beschrieben. Eines der Ziele dieser Doktorarbeit war die Realisierung laborbasierter XCT, sodass die Methode unabhängig von Synchrotrons eingesetzt werden kann. Dazu wurde eine lasergetriebene XUV-Quelle entwickelt, deren Konzept in *M. Wünsche, S. Fuchs et al. „Verfahren und Vorrichtung zur Erzeugung von Laserlicht mit definierten Spektraleigenschaften“ (DE102014018511A1)* [41] zum Patent angemeldet und in *M. Wünsche, S. Fuchs et al. Optics Express (2017)* [5] publiziert wurde. Für die laborbasierte XCT wurde ein komplett überarbeitetes XCT-Mikroskop konzipiert, gebaut und sukzessiv verbessert. Es wurde außerdem ein eindimensionaler Phasenrekonstruktionsalgorithmus entwickelt, welcher konzeptbedingte Mehrdeutigkeitsartefakte aus dem XCT-Signal beseitigt und so erstmals eindeutige Probenrekonstruktionen ermöglicht. Die experimentelle Demonstration von laserbasierter, eindeutig rekonstruierbarer XCT ist, zusammen mit dem Algorithmus, in *S. Fuchs et al. Optica (2017)* [6] publiziert. Eine alternative Technik zur Beseitigung der Mehrdeutigkeitsartefakte wurde entwickelt und ist in *S. Fuchs et al. „Verfahren und Vorrichtung zur Bestimmung der ein- oder mehrdimensionalen Struktur von Objekten mittels Strahlung kurzer Wellenlänge“ (DE102014007106A1)* [42] zum Patent angemeldet. Die technische Umsetzung wurde bereits in den neuen XCT-Mikroskopaufbau integriert und der erste experimentelle Test des neuen Konzeptes wird in naher Zukunft durchgeführt.

Diese Arbeit ist mit dem Ziel verfasst worden, dem Leser einen umfassenden Einblick in die Prinzipien und Funktionsweisen von XCT zu ermöglichen, ohne dass der Einsatz von Fremdliteratur notwendig ist. Deshalb wurde die Arbeit in einem eher didaktischen Stil strukturiert und es werden unter anderem die Grundlagen der Interferometrie, der OCT sowie der Phasenrekonstruktionsalgorithmus ausführlich behandelt.

2 Einführung in die XUV-Mikroskopie

Mikroskopie im XUV hat im Vergleich zur konventionellen Mikroskopie mit sichtbarem Licht zwei entscheidende Vorteile. Zum einen verbessert sich durch die viel kürzere Wellenlänge die erreichbare Auflösung um Größenordnungen. Zum anderen unterscheiden sich die optischen Eigenschaften der Stoffe bzw. Stoffzusammensetzung von zu untersuchenden Proben ganz erheblich vom sichtbaren Spektralbereich [22, 23, 43]. Im XUV bestimmen typischerweise nicht die Übergänge der Außenelektronen bzw. die chemischen Bindungen der Stoffe die optischen Eigenschaften sondern Übergänge von Innerschalenelektronen. Dies hat zur Folge, dass der Kontrast in der XUV-Mikroskopie (Absorptions- und Phasenkontrast) im Wesentlichen nur von der stöchiometrischen Elementzusammensetzung (Art und Dichte) der zu untersuchenden Probe und nicht wie im sichtbaren Spektralbereich von den chemischen Bindungen abhängt. Da die meisten Elemente im XUV-Bereich wohldefinierte Übergänge (Resonanzen bzw. Absorptionskanten) besitzen und der Absorptionswirkungsquerschnitt im Allgemeinen sehr groß ist [25], entsteht durch die Wahl entsprechender Wellenlängen ein starker Absorptions-Elementkontrast bzw. -Materialkontrast. Der Realteil der Brechzahl liegt im XUV jedoch im Allgemeinen sehr nah an 1 (typischerweise kleiner als 1), weshalb der Phasen-Materialkontrast eher schwach ausgesprägt ist. Obwohl der starke Absorptionskontrast im XUV für viele Anwendungen, insbesondere in der Bildgebung von biologischen Proben, entscheidende Vorteile gegenüber Mikroskopie im sichtbaren Bereich hat [23, 24], führt er allerdings auch dazu, dass die Eindringtiefen ($1/e$ -Abfall) in Festkörpern und Flüssigkeiten typischerweise im Bereich weniger Nanometer bis weniger Mikrometer liegen. In Transmissionsgeometrie führt dies dazu, dass je nach Materialzusammensetzung und Wahl der Wellenlänge nur entsprechend dünne Proben untersucht werden können. Im Gegensatz zur Bildgebung mit noch härterer Röntgenstrahlung, die zwar noch höhere Auflösung erlaubt, jedoch nur schwach wechselwirkt, ist die Streuamplitude an Grenzflächen unterschiedlicher Brechzahlen im XUV in vielen Fällen noch ausreichend hoch, um auch in Reflexionsgeometrie Mikroskopie zu betreiben. Somit können oberflächennahe Strukturen auch von dicken Proben zerstörungsfrei (ohne dass Schnitte notwendig sind) untersucht werden. Um eine möglichst hohe Eindringtiefe zu erreichen, ist es sinnvoll XUV-Mikroskopie in sogenannten Transmissionsfenstern der zu untersuchenden Proben zu betreiben. In diesen spektralen Bereichen, die typischerweise zwischen zwei Absorptionskanten der enthaltenen Elemente liegen, ist die Eindringtiefe erhöht. So lassen sich im sogenannten Silizium-Transmissionsfenster von $\approx 30 \text{ eV} - 99,8 \text{ eV}$ (Abfall der plasmonischen Effekte bei $\approx 30 \text{ eV}$ [44] und L_2/L_3 -Kante [25] von Silizium) siliziumbasierte Proben bis zu einer Tiefe von ca. $1 \mu\text{m}$ durchdringen. Dadurch ist eine zerstörungsfreie Bildgebung von vergrabenen siliziumbasierten Halbleiterstrukturen mit

Nanometerauflösung möglich, was ein großes Anwendungspotential in der Halbleiterindustrie hat. Das sogenannte Wasserfenster von 277 eV – 525 eV bezeichnet den Bereich erhöhter Eindringtiefe in biologische, also hauptsächlich aus Wasser und Kohlenstoff bestehende Proben im Spektralbereich zwischen der Sauerstoff $K_{\alpha 1}$ -Linie und der Kohlenstoff $K_{\alpha 1}$ -Linie [25]. So können Eindringtiefen von bis zu 10 μm in biologischen Proben erreicht werden [45]. Kohlenstoff absorbiert dabei in diesem Bereich wesentlich stärker als das umgebende Wasser, sodass ein hoher Kontrast zwischen kohlenstoffreichen und kohlenstoffarmen Gebieten entsteht, also beispielsweise die inneren Strukturen von Zellen gut abgebildet werden können, ohne dass vorheriges Einfärben („Labeling“) notwendig ist [23]. Auch Stickstoff hat eine Absorptionskante im Wasserfenster ($K_{\alpha 1}$ bei 392 eV), sodass auch dieses Element, welches ebenfalls häufig in biologischen Proben vorkommt, hohen Kontrast liefert.

2.1 XUV-Mikroskopie im Vergleich zu anderen hochauflösenden Methoden

Die wohl bekannteste und weit verbreitetste Mikroskopie-Methode mit Nanometerauflösung ist die bereits lang existierende Elektronenmikroskopie [20, 46]. Wie auch in der XUV-Mikroskopie muss auch im Elektronenmikroskop die Strahlung im Vakuum transportiert werden. Die maximal erreichbare Auflösung von XUV-Mikroskopen ist zwar geringer als bei Elektronenmikroskopen, jedoch bietet die XUV-Mikroskopie einige Vorteile. Die Eindringtiefe von XUV-Strahlung ist im Vergleich zu Elektronen verhältnismäßig hoch. Dadurch können wesentlich dickere Proben untersucht werden. So ist es im Wasserfenster möglich, komplette Zellen abzubilden [45]. Auch eingebettete Halbleiterstrukturen können zerstörungsfrei untersucht werden [47]. Im Elektronenmikroskop müssen dafür immer Schnitte der Zellen bzw. der Halbleiter angefertigt und einzeln untersucht werden. Des Weiteren erlaubt das höhere Durchdringungspotential den Einsatz von dünnen Vakuumfenstern, die XUV-Strahlung transmittieren und es so ermöglichen, Proben unter atmosphärischen Bedingungen zu untersuchen [48]. Der Bildkontrast ist fundamental verschieden. Während bei der Elektronenmikroskopie Kontraste eher zwischen Elementen mit hoher Kernladungszahl entstehen, lassen sich mit XUV-Strahlung eher leichtere Elemente wie Sauerstoff und Kohlenstoff durch ihre L-Absorptionskanten gut unterscheiden. Weiterhin sind Beschichtungen von nichtleitenden Proben, die Aufladungseffekte im Elektronenmikroskop verhindern, im XUV-Bereich nicht notwendig.

Weitere verbreitete Mikroskopie-Verfahren, welche seit einigen Jahren auch nanoskalige Auflösung unterstützen, basieren auf der Fluoreszenzmikroskopie im sichtbaren bzw. nahen infraroten Spektralbereich [49]. Durch Methoden wie STED [50, 51] oder PALM [52, 53], deren Erfinder mit dem Nobelpreis für Chemie [54] geehrt wurden, ist es möglich, Farbstoffe

- sogenannte Fluoreszenzmarker - mit wenigen Nanometern Auflösung zu detektieren (siehe auch Kap. 6.1.1). Durch die Möglichkeit diese Fluoreszenzmarker an biologisch-funktionelle Strukturen zu binden, was als „Labeling“ bezeichnet wird, ist es möglich, neben strukturellen auch dynamische und funktionelle Fragestellungen mit hoher Auflösung zu adressieren. Aufgrund der breiten Palette an Markern und der wachsenden Anzahl an immunologischen und genetischen Verfahren, diese Marker gezielt zu platzieren, sind die Einsatzmöglichkeiten extrem vielfältig. Diese Methoden sind deshalb mittlerweile ein nicht mehr wegzudenkender Bestandteil biologischer Forschung. Das notwendige „Labeling“ bedingt allerdings auch, dass die zu untersuchenden Proben entsprechend präpariert und somit verändert werden müssen. Um strukturelle Informationen aus nicht eingefärbten Proben zu erhalten, werden deshalb auch Elektronenmikroskope standardmäßig eingesetzt [55]. XUV-Mikroskope sind jedoch ebenfalls in der Lage, ungefärbte Proben mit hoher struktureller, konventioneller Auflösung zu untersuchen mit den oben beschriebenen Vorteilen gegenüber dem Elektronenmikroskop.

Trotz der beschriebenen Vorteile, Möglichkeiten und Anwendungsfelder wird die XUV-Mikroskopie bisher jedoch verhältnismäßig wenig eingesetzt. Dies liegt aber nicht an vermeintlich fehlenden Anwendungsgebieten oder Fragestellungen, sondern hauptsächlich daran, dass es bis vor wenigen Jahren keine geeigneten Strahlungsquellen im Labormaßstab gab. Bis heute sind die meisten XUV-Mikroskope auf Großforschungsanlagen mit Synchrotronstrahlungsquellen [56] beschränkt und die meisten Bildgebungsverfahren sind auch für diese Art der Strahlungsquellen entwickelt worden. Des Weiteren sind auch die technologischen Anforderungen an Optik und Diagnostik sehr hoch. Erst in den letzten Jahren wurde die XUV-Optik und Technologie dank der Entwicklung in der Halbleiter-Lithographie hin zu XUV-Wellenlängen in großem Maßstab vorangetrieben [57] und so auch preislich attraktiver. Auch werden durch diese Entwicklung neue Anwendungsfelder, beispielsweise in der Inspektion von lithographischen Masken geschaffen [28]. Weiterhin wurden in der Entwicklung von lasergetriebener laborbasierter XUV-Erzeugung große Fortschritte erzielt, sodass mittlerweile eine Vielzahl an Gruppen daran arbeitet, bestehende Verfahren vom Synchrotron an Laserquellen zu übertragen und weiterzuentwickeln [32–37] oder neue Verfahren wie z.B. die hier vorgestellte XUV-Kohärenztomographie [1, 6, 7] zu erforschen.

Die laborbasierte XUV-Mikroskopie ist ein junges Feld und es ist zu erwarten, dass mit der im Vergleich zum Synchrotron hohen Verfügbarkeit entsprechender Geräte ihre Verbreitung und ihr Einsatz stark zunehmen werden.

2.2 Mikroskopiemethoden im XUV

Aufgrund der starken Absorption im XUV können keine konventionellen transmittierenden Optiken verwendet werden. Standardkomponenten wie Linsen oder transmittierende Strahlteiler sind im XUV-Bereich deshalb nicht praktikabel [22]. Stattdessen müssen reflektive Optiken zur Strahlführung und Fokussierung eingesetzt werden. Die Brechzahl der meisten Medien im XUV liegt nah bei 1 [25]. Dies führt zusätzlich dazu, dass die Reflektivität an einfachen Grenzschichten unter senkrechtem Einfall gering ist. Die reflektiven Optiken müssen entsprechend unter sehr flachen Einfallswinkeln betrieben werden. Um nanoskalige Auflösungen im XUV mit einem konventionellen Mikroskopaufbau zu erreichen, muss jedoch mit einer hohen numerischen Apertur fokussiert werden. Dies hat zur Folge, dass die unter flachem Einfall fokussierenden Optiken sehr groß dimensioniert sein müssen. Außerdem sind die Oberflächenformen, die für die aberationsfreie Fokussierung notwendig sind, nicht sphärisch. Trotzdem muss die Formtreue über den gesamten gekrümmten Spiegel besser sein als die Wellenlänge, also im Bereich von wenigen Nanometern liegen. Die Herstellung entsprechender Optiken ist extrem aufwendig und damit teuer. Derartige Spiegel werden deshalb typischerweise an Synchrotron-Strahlungsquellen zur Fokussierung eingesetzt [58].

Dank der Perfektionierung moderner Dünnschichtverfahren ist es möglich, die optischen Eigenschaften von Oberflächen auch im XUV-Bereich gezielt zu beeinflussen [59]. Entsprechend beschichtete Optiken erreichen hohe Reflektivitäten (teilweise bis 75%) [60] für eine bestimmte Wellenlänge im XUV auch unter senkrechtem Einfall. Dadurch wird es möglich, sphärische Oberflächen zur Fokussierung zu benutzen, deren Herstellung technisch wesentlich einfacher und die erreichbare Formtreue wesentlich besser ist, als bei nicht-sphärischen Oberflächen. Entsprechende Objektive mit hohen numerischen Aperturen werden bereits kommerziell in der Halbleiterlithographie in XUV-Mikroskopen zur Belichtung als auch zu Diagnostikzwecken [28] eingesetzt. Für den breiten Einsatz von laborbasierten XUV-Mikroskopen ist aber auch diese Technologie zu teuer. Außerdem ist sie durch die Beschichtung im Gegensatz zu Spiegeln unter streifendem Einfall auf genau eine Wellenlänge beschränkt.

Eine weitere Realisierung von XUV-Mikroskopie basiert auf der Verwendung von transmittierenden Fresnel'schen Zonenplatten [61–63]. Allerdings sind auch hier die technischen Anforderungen an die Genauigkeit bei der Herstellung speziell für hohe numerische Aperturen extrem hoch und die Anschaffung teuer. Durch die Abhängigkeit der Fokuslänge von der Wellenlänge, sind entsprechende XUV-Mikroskopieaufbauten ebenfalls monochromatisch².

Unter anderem aufgrund der oben beschriebenen Einschränkungen und der hohen Anforderungen an konventionelle Optiken wurden Abbildungsverfahren für den XUV- und

²Für begrenzte Bandbreiten existieren auch polychromatische Zonenplatten [64].

Röntgenbereich entwickelt, die keine abbildende Optik benötigen [9]. Das vom Objekt gestreute Licht wird dazu direkt mit einem Detektor meistens im Fernfeld aufgenommen. Wäre die Phase des Lichtes am Detektor bekannt, könnte das Feld durch eine 2D-Fouriertransformation einfach algorithmisch zurückpropagiert und so das streuende Objekt rekonstruiert werden. Bei der Messung der Intensität mit einem Detektor (z.B. CCD-Kamera oder Photoplatte) gehen jedoch die Phaseninformationen verloren. Ohne die Phasen ist eine Rückpropagation und damit eine Rekonstruktion im Allgemeinen nicht möglich. Durch den Einsatz von kohärenten Strahlungsquellen und der Bedingung, dass das zu untersuchende Objekt kleiner ist, als der ausgeleuchtete Bereich auf der Probe, wurden jedoch sogenannte Phasenrekonstruktions-Algorithmen [65] entwickelt, die in der Lage sind, das streuende Objekt nur aus den Amplituden des gestreuten Feldes zu rekonstruieren (siehe auch Kap. 6.1). Derartige Verfahren werden als „linsenlose Abbildung“ bzw. „Coherent Diffraction Imaging“ (CDI) bezeichnet. Durch Holographie, also die Überlagerung des gestreuten Feldes mit einer bekannten Referenzwelle, ist es auch möglich die gesuchten Phasen direkt zu messen [66, 67]. Jedoch ist die Herstellung der entsprechenden Referenzwelle im XUV meist aufwendig und der nutzbare Photonenfluss wird stark beschränkt. Die Auflösung der kohärenten linsenlosen Verfahren ist neben der verwendeten Wellenlänge nur durch die vom Detektor aufgenommene numerische Apertur begrenzt. Da keine abbildenden Optiken benötigt werden, ist der experimentelle Aufbau einfach und kann kostengünstig realisiert werden. Der Detektor kann sehr nah an der Probe platziert und somit eine sehr hohe Auflösung erzeugt werden. Die Methode ist jedoch im Allgemeinen auf räumlich und zeitlich kohärente und somit monochromatische Strahlungsquellen beschränkt. Außerdem benötigen die im Falle von CDI verwendeten Phasenrekonstruktionsalgorithmen eine hohe Rechenleistung und sind zudem anfällig gegenüber Rauschen, sodass eine Konvergenz zur richtigen Objektrekonstruktion nicht immer gewährleistet werden kann.

Wie XUV-Mikroskopie mit beschichteten Oberflächen oder Zonenplatten wurden auch die linsenlosen Verfahren für monochromatische Synchrotron-Strahlungsquellen entwickelt, da laborbasierte XUV-Quellen lange Zeit nicht den zur Bildgebung nötigen Photonenfluss liefern konnten. Mit der Entwicklung von leistungsstarken Lasern und entsprechenden Erzeugungsverfahren wie laserinduzierte Plasmen oder die Erzeugung hoher Harmonischer können mittlerweile jedoch Flüsse erreicht werden, die, zumindest im niedrigen Energiebereich bis 100 eV, an den Fluss von Synchrotrons heranreichen [31]. Die laserbasierten Quellen strahlen im Gegensatz zu Undulatorquellen jedoch intrinsisch breitbandig ab. Das bedeutet, dass sehr viel Energie des treibenden Lasers in Wellenlängen konvertiert wird, die für die etablierten monochromatischen Verfahren nicht nutzbar und damit verloren ist. Laserplasma-Quellen können zwar derart optimiert werden, dass elektronische Übergänge und damit quasimonochromatische Linienstrahlung genutzt werden kann, trotzdem

wird ein Großteil der Energie in einen spektral breiten Hintergrund abgestrahlt. Bei der Erzeugung hoher Harmonischer verhält es sich ähnlich. Zwar können die einzelnen Harmonischen eine geringe Bandbreite haben, jedoch können sie nicht isoliert erzeugt werden. Nutzt man eine einzelne Harmonische zur Bildgebung, geht der Photonenfluss in den nicht genutzten harmonischen Ordnungen für die Bildgebung verloren [68, 69]. Der nutzbare Photonenfluss, bezogen auf die Abstrahlung der Quelle im gesamten XUV-Bereich, liegt je nach Energie nur bei wenigen Prozent und darunter. Die Entwicklung von breitbandigen XUV-Mikroskopen, welche den bisher verlorenen Fluss nutzbar machen, würde die Effizienz, die benötigten Belichtungszeiten und damit die Anwendbarkeit enorm verbessern.

Für den Einsatz von konventionellen XUV-Mikroskopieverfahren werden dafür entsprechend breitbandige Optiken benötigt. Die Reflektivität von Mehrschichtsystemen sinkt mit zunehmender spektraler Bandbreite stark ab, so dass der Einsatz entsprechender Optiken den letztendlich nutzbaren Fluss nicht erhöhen würde. Zonenplatten leiden, aufgrund ihrer Funktionsweise, an großen chromatischen Aberrationen und sind deshalb ebenfalls ungeeignet. Letztendlich bleibt nur der aufwendige und teure Einsatz von reflektiven Optiken unter streifendem Einfall, die Erweiterung der linsenlosen Verfahren für polychromatische kohärente Quellen [70] oder die Entwicklung von neuen, besser an die Laborquellen angepassten Verfahren, wie der in dieser Arbeit vorgestellten XUV-Kohärenztomographie.

3 Grundlagen

3.1 Ausbreitung elektromagnetischer Wellen

Zur Vereinfachung der Darstellungen und Rechnungen wird die komplexe Schreibweise des elektrischen bzw. magnetischen Feldes verwendet. Dazu wird das reelle physikalisch messbare Feld $\mathfrak{E}(\mathbf{r}, t)$ in den komplexen Zahlenraum erweitert. Es gilt für das elektrische Feld und analog für das magnetische Feld [71, S.42f]:

$$\mathfrak{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} [\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) + \mathcal{E}^*(\mathbf{r}, t)]. \quad (3.1)$$

Im Folgenden wird

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathcal{FT} [\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(\mathbf{r}, t) e^{i\omega t} dt \quad (3.2)$$

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{FT}^{-1} [\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)] = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (3.3)$$

als Definition der Fourier-Transformation im Frequenz- bzw. Zeitraum verwendet.

3.1.1 Helmholtz-Gleichung

Mit Hilfe der Maxwell-Gleichungen kann die Ausbreitung von elektromagnetischen Wellen beschrieben werden. Unter den Voraussetzungen, dass keine externen Ladungen vorhanden und die Medien nicht magnetisch sind, ergibt sich aus den Maxwell-Gleichungen im Frequenzraum für das elektrische Feld³ [72, S.11ff]:

$$\nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)] - \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) + \mu_0\omega_0 \mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega). \quad (3.4)$$

Dabei ist $\mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega)$ der Konduktionsstrom und $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega)$ die makroskopische Polarisierung im Medium. Mit dem Drude-Modell lassen sich beide Größen in Abhängigkeit des elektrischen Feldes ausdrücken. Dazu werden die elektrische Suszeptibilität $\chi(\mathbf{r}, \omega)$ und die Leitfähigkeit $\sigma(\mathbf{r}, \omega)$ in diesem Fall für isotrope, inhomogene Medien eingeführt.

$$\nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)] - \underbrace{\frac{\omega^2}{c^2} \left[1 + \chi(\mathbf{r}, \omega) + \frac{i}{\omega\epsilon_0} \sigma(\mathbf{r}, \omega) \right]}_{\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad (3.5)$$

³ $\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$ mit den Einheitsvektoren \mathbf{e}_i

Durch das Fehlen von externen Ladungen ($\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = 0$) ergibt sich mit der komplexen dielektrischen Funktion $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$ ^{4,5}:

$$\Delta \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = -\nabla \cdot \underbrace{\left[\frac{\nabla \cdot \varepsilon(\mathbf{r}, \omega)}{\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \right]}_{\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)}. \quad (3.6)$$

Durch die Vektoroperatoren auf der rechten Seite werden die vektoriellen Komponenten des elektrischen Feldes im Allgemeinen miteinander verkoppelt. Ändert sich $\varepsilon(\omega)$ jedoch nur langsam im Ort (auf Skalen größer als $2\pi c/\omega$), gilt $\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \approx 0$, wenn $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \neq 0$ und der rechte Term kann vernachlässigt werden. Damit ergibt sich die Helmholtz-Gleichung

$$\Delta \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = 0, \quad (3.7)$$

welche die Ausbreitung transversal schwingender elektro-magnetischer Wellenfelder im Frequenzraum in inhomogenen (langsam veränderlichen) Medien beschreibt.

3.1.2 Homogene Medien

In homogenen Medien $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon(\omega)$ lösen ebene Wellen die Helmholtz-Gleichung.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \bar{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (3.8)$$

Durch Einsetzen dieses Ansatzes in die Helmholtz-Gleichung und der geforderten Divergenzfreiheit von $\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = 0$ ergibt sich die Dispersionsrelation und die Transversalität

$$\mathbf{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega) = \frac{\omega^2}{c^2} n^2(\omega) = k_0^2 n^2(\omega) \quad (3.9)$$

$$\mathbf{k} \cdot \bar{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, \omega) = 0 \quad (3.10)$$

mit der komplexen Brechzahl $n(\omega)$. Da $n(\omega) = n'(\omega) + in''(\omega)$ und damit \mathbf{k}^2 komplex ist, treten im Medium sowohl Phaseneffekte (Dispersion) als auch Absorption auf. Die Lösung für schwach gedämpfte homogene Wellen im Zeitraum ergibt sich dann durch Rücktransformation zu:

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, \omega) \underbrace{e^{-n''(\omega)\mathbf{k}_0(\omega)\mathbf{r}}}_{\text{Absorption}} \underbrace{e^{in'(\omega)\mathbf{k}_0(\omega)\mathbf{r}}}_{\text{Dispersion}} e^{-i\omega t} d\omega. \quad (3.11)$$

⁴ $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{F}) = \nabla \cdot (\nabla \cdot \mathbf{F}) - \Delta \mathbf{F}$

⁵ $\nabla \cdot (u \cdot \mathbf{F}) = u \cdot (\nabla \cdot \mathbf{F}) + \mathbf{F} \cdot (\nabla \cdot u)$

3.1.3 Stückweise homogene Medien - verallgemeinerte Fresnel'sche Formeln

In Medien, in denen sich $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$ schnell mit dem Ort ändert, kann der rechte Term in Gleichung 3.6 nicht mehr vernachlässigt werden. Die Komponenten des elektrischen Feldes koppeln miteinander, sodass ein Gleichungssystem aus drei gekoppelten Differentialgleichungen gelöst werden muss. Eine allgemeine analytische Lösung kann nicht angegeben werden. Jedoch lässt sich das Gleichungssystem entkoppeln, wenn in einer Achse Translationsinvarianz, wie etwa bei unendlich ausgedehnten Grenzflächen in einer Ebene besteht [71, S.209]. Man kann das elektrische Feld und damit auch das magnetische Feld dann in zwei senkrecht aufeinanderstehende unabhängige Komponenten (transversal elektrisch und transversal magnetisch) zerlegen. Für Translationsinvarianz in y gilt dann $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{TE}} + \mathbf{E}_{\text{TM}}$ (analog für \mathbf{H}):

$$\mathbf{E}_{\text{TE}} = \begin{pmatrix} 0 \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_{\text{TE}} = \begin{pmatrix} H_x \\ 0 \\ H_z \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

$$\mathbf{E}_{\text{TM}} = \begin{pmatrix} E_x \\ 0 \\ E_z \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_{\text{TM}} = \begin{pmatrix} 0 \\ H_y \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Die Maxwell'schen Gleichungen verknüpfen das Magnetfeld mit dem elektrischen Feld. Helmholtz-Gleichungen können sowohl für das \mathbf{E} -Feld (Gleichung 3.6) als auch für das \mathbf{H} -Feld (analog) abgeleitet werden. Es genügt deshalb, für die entkoppelten Polarisierungen die jeweils einfachste Helmholtz-Gleichung zu lösen. Im Falle von TE-Polarisation gibt es nur eine \mathbf{E} -Feldkomponente und die Helmholtz-Gleichung für das \mathbf{E} -Feld enthält dann keine Kopplungsterme. Für TM-Polarisation ist die Helmholtz-Gleichung für das magnetische Feld entkoppelt [71, S.210f].

Betrachtet man den Einfall einer ebenen Welle $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_z \mathbf{e}_z$ auf eine Grenzfläche in der x - y -Ebene, die im Halbraum $z > 0$ die Brechzahl $n_j(\omega)$ besitzt, so müssen aufgrund der Übergangsbedingungen die tangentialen Feldkomponenten, also bei TE-Polarisation E und H_x und bei TM-Polarisation H und E_x , stetig übergehen. Außerdem muss aufgrund der Homogenität des Raumes in x -Richtung auch die k_x -Komponente stetig übergehen. Dadurch wird es möglich, bei Kenntnis der Werte der Tangentialkomponenten (oder deren Ableitung) an der Grenzfläche das Feld im Halbraum $z > 0$ zu berechnen. Für den Wellenvektor im Halbraum $z > 0$ gilt natürlich die Dispersionsrelation (die Abhängigkeit des Wellenvektors von ω wird aufgrund der Übersichtlichkeit im folgenden nicht mehr

geschrieben)

$$k_j^2 = k_{jz}^2 + k_x^2 = \frac{\omega^2}{c^2} n_j^2(\omega). \quad (3.14)$$

Mit dem Ansatz (Homogenität in x)

$$\mathbf{E}(x, z, \omega) = \mathbf{E}(z, \omega) e^{ik_x x}, \quad \mathbf{H}(x, z, \omega) = \mathbf{H}(z, \omega) e^{ik_x x}, \quad (3.15)$$

gelten dann folgende Gleichungen für die z -abhängigen Felder:

$$\begin{array}{ll} \text{TE-Polarisation} & \text{TM-Polarisation} \\ 0 = \left(\frac{d^2}{dz^2} + k_{jz}^2 \right) E_y(z, \omega) & 0 = \left(\frac{d^2}{dz^2} + k_{jz}^2 \right) H_y(z, \omega) \end{array} \quad (3.16)$$

$$H_z(z, \omega) = -\frac{i}{\omega \mu_0} \frac{\partial}{\partial z} E_y(z, \omega) \quad E_z(z, \omega) = \frac{i}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon} \frac{\partial}{\partial z} H_y(z, \omega). \quad (3.17)$$

Mit den Substitutionen

$$E_y, H_y \rightarrow F \quad (3.18)$$

$$i\omega \mu_0 H_x, -i\omega \varepsilon_0 E_x \rightarrow G \quad (3.19)$$

$$\alpha_j^{\text{TM}} = \frac{1}{n_j^2} \quad \text{und} \quad \alpha_j^{\text{TE}} = 1 \quad (3.20)$$

können beide Polarisierungen simultan behandelt werden:

$$0 = \left(\frac{d^2}{dz^2} + k_{jz}^2 \right) F(z) \quad (3.21)$$

$$G = \alpha_j \frac{\partial}{\partial z} F(z). \quad (3.22)$$

Mit den Anfangswerten der Felder $F(0) = F_0$ und $G(0) = G_0$ an der Grenzfläche ergibt sich die Lösung des Gleichungssystems im Halbraum $z > 0$ zu

$$\begin{pmatrix} F(z) \\ G(z) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos(k_{jz} z) & \frac{1}{k_{jz} \alpha_j} \sin(k_{jz} z) \\ -k_{jz} \alpha_j \sin(k_{jz} z) & \cos(k_{jz} z) \end{pmatrix}}_{\mathbf{m}_j(z)} \begin{pmatrix} F_0 \\ G_0 \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Durch Hintereinander-Ausführung der Propagation durch mehrere Grenzflächen lassen sich so die Felder hinter einem stückweise homogenen Schichtsystem berechnen. Nach einem Schichtsystem mit n Schichten mit den Schichtdicken d_j und der Gesamtdicke $D = \sum_{j=1}^n d_j$ ergeben sich die Felder aus den Anfangsbedingungen durch die Multiplikation

der Matrizen $\mathbf{m}_j = \mathbf{m}_j(d_j)$ zu

$$\begin{pmatrix} F(D) \\ G(D) \end{pmatrix} = \underbrace{\prod_{j=1}^n \mathbf{m}_j}_{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} F_0 \\ G_0 \end{pmatrix} = \mathbf{m}_n \cdots \mathbf{m}_1 \begin{pmatrix} F_0 \\ G_0 \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Fresnel'sche Formeln

Im Allgemeinen sind jedoch die Anfangsbedingungen, also die Felder an der ersten Grenzfläche, nicht bekannt. Mit Hilfe der Matrixpropagation 3.24 kann jedoch bei Vorgabe eines einfallenden Wellenfeldes auf das Schichtsystem das Gesamtfeld durch Lösen des Gleichungssystems berechnet werden [71, S.211f]. Ist ein Schichtsystem eingebettet vom sogenannten „Cladding“ mit dem Brechungsindex $n_c(\omega)$ auf Seite der einfallenden Welle ($z < 0$) und dem Substrat mit der Brechzahl $n_s(\omega)$ auf Seite der transmittierten Welle ($z > D$) können folgende Wellenvektoren für das einfallende Licht (\mathbf{k}_I), das reflektierte Licht (\mathbf{k}_R) und das transmittierte Licht (\mathbf{k}_T) definiert werden:

$$\mathbf{k}_I = \begin{pmatrix} k_x \\ 0 \\ k_{cz} \end{pmatrix} \quad \mathbf{k}_R = \begin{pmatrix} k_x \\ 0 \\ -k_{cz} \end{pmatrix} \quad \mathbf{k}_T = \begin{pmatrix} k_x \\ 0 \\ k_{sz} \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

Für die Wellenvektoren gilt natürlich weiterhin die Dispersionsrelation. Der stetige Übergang der k_x -Komponente verursacht die Brechung (Änderung der Richtung des Wellenvektors) an der Grenzfläche. Fällt Licht unter einem Winkel φ zur Oberfläche ein, so gilt im Schichtsystem (und analog für Cladding und Substrat)

$$k_0 = \frac{\omega}{c} \quad (3.26)$$

$$k_x = k_0 n_c \cos(\varphi) \quad (3.27)$$

$$k_{jz} = \sqrt{(k_0 n_j)^2 - k_x^2}. \quad (3.28)$$

Im Cladding ergeben sich die Felder zu (F_I , F_R einfallendes bzw. reflektiertes Feld)

$$F_c(z) = (F_I e^{ik_{cz}z} + F_R e^{-ik_{cz}z}) \quad \Rightarrow F_0 = F_I + F_R \quad (3.29)$$

$$G_c(z) = i\alpha_c k_{cz} (F_I e^{ik_{cz}z} - F_R e^{-ik_{cz}z}) \quad \Rightarrow G_0 = i\alpha_c k_{cz} (F_I - F_R) \quad (3.30)$$

und legen somit die Anfangsbedingungen F_0 und G_0 implizit fest. Im Substrat ergibt sich

$$F_s(z) = F_T e^{ik_{sz}z} \quad \Rightarrow F(D) = F_T \quad (3.31)$$

$$G_s(z) = i\alpha_s k_{sz} F_T e^{ik_{sz}z} \quad \Rightarrow G(D) = i\alpha_s k_{sz} F_T. \quad (3.32)$$

Das transmittierte Feld lässt sich mit Gleichung (3.24) und der Matrix \mathbf{M} berechnen.

$$\begin{pmatrix} F_T \\ i\alpha_s k_{sz} F_T \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} F_I + F_R \\ i\alpha_c k_{cz} (F_I - F_R) \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

Daraus ergeben sich die verallgemeinerten Fresnel'schen Formeln:

$$F_R = \frac{(\alpha_c k_{cz} M_{22} - \alpha_s k_{sz} M_{11}) - i(M_{21} + \alpha_s \alpha_c k_{sz} k_{cz} M_{12})}{(\alpha_c k_{cz} M_{22} + \alpha_s k_{sz} M_{11}) + i(M_{21} - \alpha_s \alpha_c k_{sz} k_{cz} M_{12})} F_I \quad (3.34)$$

$$F_T = \frac{2\alpha_c k_{cz} (M_{11} M_{22} - M_{12} M_{21})}{(\alpha_c k_{cz} M_{22} + \alpha_s k_{sz} M_{11}) + i(M_{21} - \alpha_s \alpha_c k_{sz} k_{cz} M_{12})} F_I. \quad (3.35)$$

Beide Gleichungen können nun wieder auf die Polarisationsrichtungen TE und TM spezifiziert werden. Daraus können die komplexen Feld-Reflektivitäten $r(\omega)$ mit

$$E_{y,R}^{\text{TE}}(\omega) = r^{\text{TE}}(\omega) \cdot E_{y,I}^{\text{TE}}(\omega) \quad (3.36)$$

$$E_R^{\text{TM}}(\omega) = -\frac{k_c}{k_x} E_{z,R}^{\text{TM}}(\omega) = r^{\text{TM}}(\omega) \cdot E_I^{\text{TM}}(\omega) \quad (3.37)$$

berechnet werden. Für TE-Polarisation ergibt sich die Feld-Reflektivität zu:

$$r^{\text{TE}}(\omega) = \frac{(k_{cz} M_{22}^{\text{TE}} - k_{sz} M_{11}^{\text{TE}}) - i(M_{21}^{\text{TE}} + k_{sz} k_{cz} M_{12}^{\text{TE}})}{(k_{cz} M_{22}^{\text{TE}} + k_{sz} M_{11}^{\text{TE}}) + i(M_{21}^{\text{TE}} - k_{sz} k_{cz} M_{12}^{\text{TE}})}. \quad (3.38)$$

Im Fall der TM-Polarisation ist die Reflektivität des elektrischen Feldes

$$r^{\text{TM}}(\omega) = \frac{(n_s^2 k_{cz} M_{22}^{\text{TM}} - n_c^2 k_{sz} M_{11}^{\text{TM}}) - i(n_s^2 n_c^2 M_{21}^{\text{TM}} + k_{sz} k_{cz} M_{12}^{\text{TM}})}{(n_s^2 k_{cz} M_{22}^{\text{TM}} + n_c^2 k_{sz} M_{11}^{\text{TM}}) + i(n_s^2 n_c^2 M_{21}^{\text{TM}} - k_{sz} k_{cz} M_{12}^{\text{TM}})}. \quad (3.39)$$

Für die Feld-Transmissivitäten θ ergibt sich analog

$$\theta^{\text{TE}}(\omega) = \frac{2k_{cz}}{(k_{cz} M_{22}^{\text{TE}} + k_{sz} M_{11}^{\text{TE}}) + i(M_{21}^{\text{TE}} - k_{sz} k_{cz} M_{12}^{\text{TE}})} \quad (3.40)$$

$$\theta^{\text{TM}}(\omega) = \frac{2n_s n_c k_{cz}}{(n_s^2 k_{cz} M_{22}^{\text{TM}} + n_c^2 k_{sz} M_{11}^{\text{TM}}) + i(n_s^2 n_c^2 M_{21}^{\text{TM}} - k_{sz} k_{cz} M_{12}^{\text{TM}})}. \quad (3.41)$$

Da die Brechzahlen komplex sind, wird mit dem Matrixformalismus (im Folgenden auch Matrixmethode genannt) sowohl die Dispersion der Schichten als auch die Absorption berücksichtigt. Die gesamte Betrachtung wurde im Frequenzraum durchgeführt. Der multiplikative Zusammenhang (Gl. 3.36 und 3.37) zwischen den reflektierten Feldern und der Feld-Reflektivität gilt daher nur im Frequenzraum. Die Felder im Zeitbereich können dann durch die Fourier-Transformation berechnet werden.

3.2 Statistische Optik

Bisher wurden die optischen Felder als vollständig deterministisch betrachtet. Mit Hilfe der Wellengleichung und Anfangsbedingungen (bzw. Randbedingungen) lässt sich die Feldstärke an jedem Ort und zu jeder Zeit vorhersagen. Schwanken die Randbedingungen bzw. die Anfangswerte jedoch stochastisch und sind deshalb nicht exakt bekannt, so werden auch die berechneten Vorhersagen nicht mit Sicherheit eintreten. Die Vorhersagegenauigkeit ist umso schlechter, je größer der räumliche und zeitliche Abstand von den vorgegebenen Randwerten ist. Bei Messungen mit realen Lichtquellen sind die Randwerte, also beispielsweise die tatsächliche Feldverteilung der Lichtquelle, nicht exakt bekannt. Thermische Lichtquellen bestehen aus vielen einzelnen stochastisch unabhängigen Emissionsprozessen. Die Feldverteilung schwankt also statistisch. Selbst bei monochromatischen Laserquellen treten typischerweise Schwankungen, wie Phasenverschiebungen (z.B. CE-Phasen) oder schwankende Amplituden auf. Das Feld selbst stellt demnach keine ideale Messgröße für Experimente mit realen Lichtquellen dar. Besser geeignet sind statistische Kenngrößen wie Mittelwert und Varianz der Felder. Die in der Optik wohl gebräuchlichste gemittelte Messgröße ist die Intensität.

3.2.1 Optische Intensität

Die optische Intensität $\mathcal{I}(\mathbf{r}, t)$ ist als Ensemblemittelwert über den Betrag des Poyntingvektors (Kreuzprodukt aus den physikalischen, realen elektrischen und magnetischen Feldern) $\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ definiert. Für transversale elektromagnetische Felder in nicht dispersiven Medien ($n = n' = \text{konst.}$) gilt mit dem skalaren komplexen Feld $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ ⁶ [71, S.405f]:

$$\mathcal{I}(\mathbf{r}, t) = \langle |\mathbf{S}(\mathbf{r}, t)| \rangle = \frac{\varepsilon_0 n c}{2} \langle |\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)|^2 \rangle. \quad (3.42)$$

Der Ensemblemittelwert $\langle \cdot \rangle$ ist dabei die Mittelung über viele stochastisch schwankende instantane Intensitäten $|\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)|^2$. Um ihn zu bilden, müssten die instantanen Intensitäten im selben Experiment sehr oft und unter gleichen Bedingungen hintereinander gemessen und danach gemittelt werden. Im Falle eines stationären optischen Feldes, dessen statistische Mittelwerte zeitinvariant sind, kann der Ensemblemittelwert jedoch durch eine

⁶Im Folgenden wird mit skalaren Wellenfeldern gearbeitet und somit die Polarisation nicht mehr erfasst bzw. es wird davon ausgegangen, dass das Licht linear polarisiert auf einer Achse ist. Das skalare Feld $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ ist dann die auf die Polarisationsrichtung projizierte (komplexe) Komponente des vektoriellen Feldes $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$. An Stellen innerhalb der Arbeit, an denen die Polarisation von Bedeutung ist, wird gesondert darauf eingegangen.

zeitliche Mittelung berechnet werden:

$$\mathcal{I}(\mathbf{r}) = \frac{\varepsilon_0 n c}{2} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T |\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)|^2 dt. \quad (3.43)$$

Durch die Bedingung der Zeitinvarianz gilt Gl. 3.43 nicht für isolierte Pulse, da dort die Intensität eben gerade nicht zeitinvariant ist. Für kurze Pulse wird deshalb meist die instantane und nicht die gemittelte Intensität verwendet⁷.

3.2.2 Autokorrelation und zeitliche Kohärenz

Eine weitere wichtige Messgröße für statistisches Licht ist die zeitliche Autokorrelationsfunktion. Sie gibt an, wie das Feld mit sich selbst zu einem anderen Zeitpunkt korreliert. Sie ist wie folgt definiert [71, S.407]:

$$\begin{aligned} \Gamma(\mathbf{r}, \tau) &= \langle \mathcal{E}^*(\mathbf{r}, t) \mathcal{E}(\mathbf{r}, t + \tau) \rangle \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \mathcal{E}^*(\mathbf{r}, t) \mathcal{E}(\mathbf{r}, t + \tau) dt. \end{aligned} \quad (3.44)$$

$\Gamma(\mathbf{r}, \tau)$ wird auch als zeitliche Kohärenzfunktion bezeichnet. Die Kohärenz gibt demnach den Grad der Korrelation der Lichtwelle mit sich selbst an. Dabei ist $\langle \cdot \rangle$ wieder der Ensemblemittelwert. Die Darstellung über die zeitliche Mittelung ist wie schon bei der Intensität streng genommen nur dann möglich, wenn der Mittelwert zeitinvariant, also das Feld stationär ist. Es ist jedoch üblich, auch für nicht stationäre Felder wie kurze Pulse die Autokorrelationsfunktion über die zeitliche Mittelung zu definieren. Es ändert sich dann die Interpretation. Die Autokorrelationsfunktion ist eigentlich ein Maß für die Vorhersagbarkeit des Feldes $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t + \tau)$, wenn $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ bekannt ist. Das ist natürlich nur sinnvoll, wenn im Mittel zu jeder Zeit t die Feldamplitude konstant ist. Im Falle von kurzen Pulsen und der Definition über die zeitliche Mittelung fällt die Autokorrelationsfunktion mit zunehmendem τ ab, obwohl die Phasenbeziehung der Felder komplett deterministisch also vollständig korreliert sein kann. Der Wert bestimmt sich dann maßgeblich aus den Amplitudenverhältnissen der Felder. Man kann also durch eine Messung der Autokorrelationsfunktion über eine zeitliche Mittelung (wie zum Beispiel im Michelson-Interferometer 3.3) nicht entscheiden, ob das Licht stationär stochastisch schwankt oder die Amplituden zeitlich nicht konstant sind (Pulse).

Da die zeitliche Kohärenzfunktion $\Gamma(\mathbf{r}, \tau)$ zur Zeit $\tau = 0$ proportional zur Intensität des

⁷Für quasi-stationäre Felder, wie einer gepulsten Laserquelle mit einer konstanten Repetitionsrate, ist die Zeitinvarianz des Mittelwertes wieder gegeben und die (zeitunabhängige) Intensität als Mittelung über viele einzelne Pulse definiert.

Lichtes ist

$$\mathcal{I}(\mathbf{r}) = \frac{\varepsilon_0 n c}{2} \Gamma(\mathbf{r}, 0), \quad (3.45)$$

ist es sinnvoll, den dimensionslosen zeitlichen Kohärenzgrad $\gamma(\mathbf{r}, \tau)$ einzuführen.

$$\gamma(\mathbf{r}, \tau) = \frac{\langle \mathcal{E}^*(\mathbf{r}, t) \mathcal{E}(\mathbf{r}, t + \tau) \rangle}{\langle \mathcal{E}^*(\mathbf{r}, t) \mathcal{E}(\mathbf{r}, t) \rangle} \quad (3.46)$$

Der Betrag des Kohärenzgrades kann Werte von 0 (vollständig inkohärent) bis 1 (vollständig kohärent) annehmen. Wenn $|\gamma(\mathbf{r}, \tau)|$ monoton mit der Zeitdifferenz abnimmt, kann eine Kohärenzzeit $\Delta\tau_K$ eingeführt werden, deren Wert durch die Breite (z.B. FWHM) von $|\gamma(\mathbf{r}, \tau)|$ definiert ist. Über die Dispersionsrelation lässt sich auch eine Kohärenzlänge $\Delta l_K = c\Delta\tau_K/n$ definieren.

3.2.3 Spektrum

Eine weitere Messgröße ist der Ensemblemittelwert über den Betrag der Fourier-Transformation des Feldes $\pi\varepsilon_0 n c \langle |E(\mathbf{r}, \omega)|^2 \rangle$ ⁸. Sie wird als spektrale Energiedichte bezeichnet und gibt an, wie groß die mittlere Energie pro Flächeninhalt im Intervall zwischen ω und $\omega + d\omega$ ist. Für stationäre Felder ist die spektrale Energiedichte unendlich. Es ist deshalb sinnvoller, die spektrale Leistungsdichte $S(\omega)$ zu verwenden. Sie gibt die mittlere Leistung pro Flächeninhalt im Frequenzintervall zwischen ω und $\omega + d\omega$ an und wird häufig einfach als Spektrum bezeichnet⁹. Das Spektrum ist so definiert, dass es nur für positive Frequenzen Werte ungleich 0 enthält [71, S.409ff]:

$$S(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \left\langle \left| \int_{-T}^T \mathcal{E}(\mathbf{r}, t) e^{i\omega t} dt \right|^2 \right\rangle. \quad (3.47)$$

Damit ergibt sich die Intensität zu

$$\mathcal{I}(\mathbf{r}) = \int_0^\infty S(\mathbf{r}, \omega) d\omega. \quad (3.48)$$

Zur experimentellen Messung des Spektrums verwendet man häufig ein Spektrometer. Diese Geräte trennen die verschiedenen Frequenzanteile meist in einer Raumdimension auf und messen dann ortsabhängige Intensitäten (Messgröße $\langle |E(\mathbf{r}, \omega)|^2 \rangle$).

⁸Auch hier gilt, dass das skalare Feld $E(\mathbf{r}, \omega)$ die komplexe Feldamplitude des Vektorfeldes $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ ist.

⁹Genau genommen müsste sie aber spektrale Intensitätsdichte heißen, da die Messgröße die Intensität und nicht die Leistung direkt ist.

3.2.4 Wiener-Khinchin-Theorem

Ein in der statistischen Optik zentraler Zusammenhang zwischen dem Spektrum $S(\mathbf{r}, \omega)$ und der Kohärenzfunktion $\Gamma(\mathbf{r}, \tau)$ ist das Wiener-Khinchin-Theorem (WKT) [71, S.410]

$$S(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(\mathbf{r}, \tau) e^{i\omega\tau} d\tau. \quad (3.49)$$

Es besagt, dass Kohärenzfunktion und Spektrum über eine Fourier-Transformation verknüpft sind (Beweis siehe Anhang A.4). Das WKT gilt unabhängig von der Ausgestaltung des Ensemblemittelwertes und somit von der Art der Lichtwelle. Es spielt also keine Rolle, ob das Licht stationär oder nicht stationär und stochastisch oder deterministisch ist. Nur die Interpretation der Kohärenzfunktion ändert sich entsprechend (siehe Kapitel 3.2.2).

Betrachtet man ein gaußförmiges Spektrum mit der Breite (FWHM) $\Delta\omega_G$, ist der Betrag der Kohärenzfunktion ebenfalls gaußförmig mit der Kohärenzzeit (FWHM)

$$\Delta\tau_K = \frac{8 \ln 2}{\Delta\omega_G}. \quad (3.50)$$

Ein breites Spektrum führt also zu einer kurzen Kohärenzzeit und umgekehrt.

3.3 Das Michelson-Interferometer

Die Messung der zeitlichen Autokorrelationsfunktion (Gl. 3.44) eines optischen Feldes erfordert es, das Feld mit einer zeitlich verschobenen Kopie seiner selbst zu überlagern und dann den Ensemblemittelwert zu bilden. Experimentell kann dies mit Hilfe eines Interferometers umgesetzt werden. Die Kopie kann mit Hilfe von Strahlteilern hergestellt und die zeitliche Verzögerung durch unterschiedliche Laufzeiten für die beiden Teilwellen hergestellt werden. Das wohl am häufigsten verwendete Interferometer ist das sogenannte Michelson-Interferometer (siehe Abb. 3.1) [73]. Die eingehende Lichtwelle wird mit einem Strahlteiler in verschiedene Richtungen aufgeteilt und in zwei unabhängige Arme geschickt, an deren Ende jeweils ein Spiegel befestigt ist. Das von den beiden Spiegeln reflektierte Licht wird mit Hilfe desselben Strahlteilers wieder überlagert.

3.3.1 Intensitätssignal in Abhängigkeit der Armlängen

Durch Änderung der Armlängen kann die Laufzeit variiert werden. Am Interferometerausgang wird dann die Intensität in Abhängigkeit des Gangunterschiedes beider Teilwellen gemessen. Bei genauerer Betrachtung werden die Felder in beiden Armen jedoch nicht direkt *zeitlich* zueinander verschoben. Vielmehr wird die Welle mit ihrer in der *räumlichen* Dimension der Ausbreitungsrichtung (im Folgenden z genannt und als ebene Welle

angenommen) verschobenen Kopie überlagert. Mit einem Strahlteiler, der die einfallende Intensität in gleiche Teile aufspaltet, den Armlängen z_1 und z_2 und einer Eingangsintensität von I_0 ergibt sich für nicht absorbierende Medien ($n_1(\omega), n_2(\omega)$) in beiden Armen die am Ausgang (in Vakuum bzw. Luft $n \approx 1$) gemessene Intensität zu¹⁰:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_A(z_1, z_2; n_1, n_2) &= \frac{\varepsilon_0 c}{8} \left\langle |\mathcal{E}_1(2z_1, t) + \mathcal{E}_2(2z_2, t)|^2 \right\rangle_t = \frac{\mathcal{I}_0}{2} + \frac{\varepsilon_0 c}{4} \Re [\langle \mathcal{E}_1^*(2z_1, t) \mathcal{E}_2(2z_2, t) \rangle_t] \\ &= \frac{\mathcal{I}_0}{2} + \frac{\varepsilon_0 c}{4} \Re [\Gamma_{12}(z_1, z_2; n_1, n_2)] . \end{aligned} \quad (3.51)$$

Der Detektor eines Michelson-Interferometers ist in den meisten Fällen zeitlich integrierend. Deshalb ist der Ensemblemittelwert durch das zeitliche Mittel $\langle \cdot \rangle_t$ festgelegt. Für nicht stationäre Signale entspricht er damit nicht dem tatsächlichen Ensemblemittelwert, da er beispielsweise für Signale mit endlicher Länge gegen 0 konvergiert. Solche Signale können dann entweder als sich wiederholend also quasi-stationär erweitert werden oder die zeitliche Mittelung darf nur über einen begrenzten Zeitbereich erfolgen. Genau betrachtet wird im Michelson-Interferometer also eine räumliche und keine - wie oftmals vereinfacht dargestellt - zeitliche Korrelationsfunktion gemessen. Tatsächlich ist der Zusammenhang zwischen dieser räumlichen Korrelation und der ursprünglich gesuchten zeitlichen Korrelation nicht trivial. Für den Interferenzterm in Gleichung 3.51 ergibt sich mit der Faltung $*$ ¹¹, wie im Anhang A.1 gezeigt,

$$\begin{aligned} \Gamma_{12}(z_1, z_2; n_1, n_2) &= \langle \mathcal{E}_1^*(2z_1, t) \mathcal{E}_2(2z_2, t) \rangle_t = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \mathcal{E}_1^*(2z_1, t) \mathcal{E}_2(2z_2, t) dt \\ &= \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega) e^{i2[k_2(\omega)z_2 - k_1(\omega)z_1]} d\omega . \end{aligned} \quad (3.52)$$

Dabei ist $S_0(\omega)$ das Spektrum des einfallenden Lichtes. Ist die Disperion in beiden Armen gleich

$$\kappa(\omega) = 2k_1(\omega) = 2k_2(\omega) = 2\omega n(\omega)/c, \quad (3.53)$$

kann die Korrelationsfunktion als Funktion der Armlängendifferenz ($\Delta z = z_2 - z_1$) ausgedrückt werden:

$$\Gamma_{12}(\Delta z) = \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega) e^{i\kappa(\omega)\Delta z} d\omega. \quad (3.54)$$

¹⁰Die x und y Koordinaten werden aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht als Argumente geschrieben.

¹¹ $f(x) * g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') \cdot g(x - x') dx'$

Man kann das Integral über eine Fourier-Transformation in κ statt dem Integral über ω ausdrücken. Dazu wird jedoch die Umkehrfunktion der Dispersionsrelation benötigt. Wenn $\kappa(\omega)$ im Bereich in dem $S_0(\omega) \neq 0$ bijektiv ist, dann existiert die Umkehrfunktion $\omega(\kappa)$ in diesem Bereich und es gilt

$$\begin{aligned}\Gamma_{12}(\Delta z) &= \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega(\kappa)) e^{i\kappa \Delta z} \left. \frac{d\omega}{d\kappa} \right|_{\kappa} d\kappa = \frac{2}{\varepsilon_0 c} \mathcal{FT}_{\kappa, \Delta z}^{-1} \left[S_0(\omega(\kappa)) \left. \frac{d\omega}{d\kappa} \right|_{\kappa} \right] \\ &= \frac{1}{\varepsilon_0 c \pi} \mathcal{FT}_{\kappa, \Delta z}^{-1} [S_0(\omega(\kappa))] * \mathcal{FT}_{\kappa, \Delta z}^{-1} \left[\left. \frac{d\omega}{d\kappa} \right|_{\kappa} \right].\end{aligned}\quad (3.55)$$

Dabei ist $\mathcal{FT}_{\kappa, \Delta z}^{-1}$ die Fourier-Transformation im Raum¹². Die Korrelationsfunktion ist also eine Faltung aus der räumlichen Fourier-Transformation des Spektrums in Abhängigkeit von κ und der Fourier-Transformation eines Dispersionsterms.

Ist das Medium nicht dispersiv ($n = \text{konst.}$), ergibt sich der bekannte Zusammenhang

$$\Gamma_{12}(\Delta z) = \frac{2}{\varepsilon_0 n} \mathcal{FT}_{\kappa, \Delta z}^{-1} [S_0(\omega(\kappa))] = \frac{2}{\varepsilon_0 n} \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega(\kappa)) e^{i\kappa \Delta z} d\kappa. \quad (3.56)$$

Mit der Rücktransformation von κ wird dann ersichtlich, dass die Korrelationsfunktion im *nicht-dispersiven* Fall gerade der zeitlichen Autokorrelationsfunktion der Lichtquelle entspricht. Mit der Laufzeitdifferenz $\Delta t = -2n\Delta z/c$ erhält man

$$\Gamma_{12}(\Delta z) = \Gamma \left(\Delta t = -\frac{2n\Delta z}{c} \right) = \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega) e^{-i\omega \Delta t} d\omega. \quad (3.57)$$

Damit ergibt sich schließlich die Intensität am Interferometerausgang nach Gleichung 3.51 im *nicht-dispersiven* Fall zu

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_A(\Delta t = -\frac{2n\Delta z}{c}) &= \frac{\mathcal{I}_0}{2} + \frac{\varepsilon_0 c}{4} \Re [\Gamma_{12}(\Delta z)] = \frac{\mathcal{I}_0}{2} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega) \cos(\omega \Delta t) d\omega \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega) [1 + \cos(\omega \Delta t)] d\omega.\end{aligned}\quad (3.58)$$

Gleichung 3.58 bildet die Grundlage für die Fourier-Transformations-Spektroskopie. Das Spektrum der Lichtquelle lässt sich bestimmen, indem man die Autokorrelationsfunktion mittels eines Interferometers misst und dann eine Fourier-Transformation durchführt.

¹² $\mathcal{F}(\Delta z) = \mathcal{FT}_{\kappa, \Delta z}^{-1} [F(\kappa)] = \int_{-\infty}^{\infty} F(\kappa) e^{i\kappa \Delta z} d\kappa$, $F(\kappa) = \mathcal{FT}_{\kappa, \Delta z} [\mathcal{F}(\Delta z)] = 1/2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}(\Delta z) e^{-i\kappa \Delta z} d\Delta z$

3.3.2 Das Spektrum am Interferometerausgang

Das Spektrum am Interferometerausgang $S_A(\omega)$ lässt sich berechnen, indem die Einzel-Felder im Frequenzbereich addiert und der Betrag gebildet wird. Mit der beschränkten Fourier-Transformation $E_T(\omega)$ ¹³ ergibt sich

$$\begin{aligned} S_A(\omega) &= \frac{\varepsilon_0 c \pi}{4} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \langle |E_{T1}(2z_1, \omega) + E_{T2}(2z_2, \omega)|^2 \rangle \\ &= \frac{\varepsilon_0 c \pi}{4} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \langle |E_{T1}(2z_1, \omega)|^2 + |E_{T2}(2z_2, \omega)|^2 + 2\Re[E_{T1}^*(2z_1, \omega)E_{T2}(2z_2, \omega)] \rangle \\ &= \frac{1}{2}S_0(\omega) + \frac{1}{2}S_0(\omega)\Re[e^{i2[k_2(\omega)z_2 - k_1(\omega)z_1]}]. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Mit gleicher Dispersion in beiden Armen ergibt sich analog zu Abschnitt 3.3.1

$$S_A(\omega) = \frac{1}{2}S_0(\omega) + \frac{1}{2}S_0(\omega)\Re[e^{i\kappa(\omega)\Delta z}] = \frac{S_0(\omega)}{2} \{1 + \cos[\kappa(\omega)\Delta z]\}. \quad (3.60)$$

Integriert man das Spektrum über alle Frequenzen, erhält man wieder die Intensität am Spektrometersausgang (siehe auch Gl. 3.51) in Abhängigkeit der Armlängendifferenz

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_A(\Delta z) &= \int_{-\infty}^{\infty} S_A(\omega) d\omega = \frac{\mathcal{I}_0}{2} + \frac{1}{2}\Re \left[\int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega) e^{i\kappa(\omega)\Delta z} d\omega \right] \\ &\stackrel{\text{Gl. 3.51}}{=} \frac{\mathcal{I}_0}{2} + \frac{\varepsilon_0 c}{4}\Re[\Gamma_{12}(\Delta z)]. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Der letzte Teil der Gleichung gilt, wie in der Rechnung im Anhang in Gleichung A.1 gezeigt, nur dann, wenn der Ensemblemittelwert als Zeitmittelung ausgeführt wird.

Zeitliche Autokorrelationsfunktion

Bisher wurde das Interferometer mit Hilfe der *räumlichen* Korrelationsfunktion $\Gamma_{12}(\Delta z)$ beschrieben, welche nur im nicht-dispersiven Fall direkt der zeitlichen Autokorrelation entspricht (Gl. 3.57). Mit Hilfe des Wiener-Khinchin-Theorems (Gl. 3.49) kann jedoch auch für den dispersiven Fall die *zeitliche* Autokorrelationsfunktion des Feldes am Ausgang des Interferometers $\Gamma_A(\tau)$ berechnet werden (ausführliche Rechnung in Anhang A.2).

$$\begin{aligned} \Gamma_A(\tau) &= \langle [\mathcal{E}_1^*(2z_1, t) + \mathcal{E}_2^*(2z_2, t)] \cdot [\mathcal{E}_1(2z_1, t + \tau) + \mathcal{E}_2(2z_2, t + \tau)] \rangle \\ &= \frac{1}{2}\Gamma(\tau) + \frac{1}{8\pi}\Gamma\left(\tau - \frac{dk}{d\omega}\bigg|_{\omega_0} \Delta z\right) * \mathcal{FT}_{\omega, \tau}^{-1} [e^{i\mathcal{O}_{\omega_0}(\omega)\Delta z}] \\ &\quad + \frac{1}{8\pi}\Gamma\left(\tau + \frac{dk}{d\omega}\bigg|_{\omega_0} \Delta z\right) * \mathcal{FT}_{\omega, \tau}^{-1} [e^{-i\mathcal{O}_{\omega_0}(\omega)\Delta z}]. \end{aligned} \quad (3.62)$$

¹³ $E_T(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-T}^T \mathcal{E}(t) e^{i\omega t} dt$

Dabei ist

$$\kappa(\omega) = \kappa(\omega_0) + \left. \frac{d\kappa}{d\omega} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\kappa}{d\omega^2} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0)^2 + \dots = \left. \frac{d\kappa}{d\omega} \right|_{\omega_0} \omega + \mathcal{O}_{\omega_0}(\omega) \quad (3.63)$$

die Taylorentwicklung der Dispersionsrelation. Durch die Fourier-Transformation des Spektrums am Interferometerausgang erhält man also verschobene zeitliche Autokorrelationsfunktionen, die noch mit einem Dispersionsterm gefaltet sind. Des Weiteren gilt $\mathcal{I}_A(\Delta z) = \Gamma_A(0)$ und man erhält im dispersiven Fall einen anderen Ausdruck für die Intensität am Ausgang des Interferometers. Die Faltung muss jedoch zunächst ausgeführt werden, bevor $\tau = 0$ gesetzt wird, da sonst der Faltungsoperator nicht definiert wäre.

Spektrum im κ -Raum

Durch die Dispersionseffekte ist die Darstellung der Zusammenhänge im Zeit- bzw. Frequenzraum immer durch Faltungen überlagert. Überführt man jedoch das Spektrum (Gl. 3.60) mit Hilfe der Dispersionsrelation in den κ -Raum und berechnet die räumliche anstatt der zeitlichen Fourier-Transformation, vereinfachen sich die Zusammenhänge. Die räumliche Fourier-Transformation des Spektrums am Ausgang, im Folgenden als $\Psi_A(\zeta)$ mit der Ortskoordinate ζ bezeichnet, ist

$$\begin{aligned} \Psi_A(\zeta) &= \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_A(\omega(\kappa)) e^{i\kappa\zeta} d\kappa \\ &= \frac{1}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ S_0(\omega(\kappa)) + S_0(\omega(\kappa)) \Re \left[e^{i\kappa\Delta z} \right] \right\} e^{i\kappa\zeta} d\kappa \\ &= \frac{1}{2} \Psi(\zeta) + \frac{1}{4} \Psi(\zeta - \Delta z) + \frac{1}{4} \Psi(\zeta + \Delta z). \end{aligned} \quad (3.64)$$

Dabei ist

$$\Psi(\zeta) = \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega(\kappa)) e^{i\kappa\zeta} d\kappa \quad (3.65)$$

die räumliche Fourier-Transformation des Quellspektrums dargestellt in κ . Das κ -Spektrum kann aus dem gemessenen Spektrum $S(\omega)$ bei Kenntnis der Dispersion $\kappa(\omega)$ bzw. $\omega(\kappa)$ berechnet werden. Für $\Psi_A(\zeta)$ ergeben sich somit um Δz verschobene Kopien der Funktion $\Psi(\zeta)$ ohne weitere Faltungen von Dispersionstermen. Es ist aber zu beachten, dass $\Psi(\zeta)$ durch die Koordinatentransformation und die Fourier-Transformation in κ nicht mehr direkt die Autokorrelation der Felder ist. So ist $\Psi_A(0)$ auch nicht mehr direkt die Intensität am Ausgang des Interferometers. Der Zusammenhang zwischen $\Psi_A(0)$ und dem räumlichen

Interferenzterm im Interferometer $\Gamma_{12}(\Delta z)$ (siehe Gleichung 3.55) ergibt sich wie folgt:

$$\begin{aligned}\Psi_A(0) &= \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_A(\omega(\kappa)) d\kappa \\ &= \frac{1}{\varepsilon_0 c} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega) \frac{dk}{d\omega} \Big|_{\omega} d\omega + \Re \left[\int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega(\kappa)) e^{i\kappa \Delta z} d\kappa \right] \right\} \\ &= \frac{1}{\varepsilon_0 c} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega) \frac{d\kappa}{d\omega} \Big|_{\omega} d\omega + \frac{1}{2\pi} \Re \left[\mathcal{FT}_{\kappa, \Delta z}^{-1} \left[\frac{1}{\frac{d\omega}{d\kappa} \Big|_{\kappa}} \right] * \frac{\varepsilon_0 c}{2} \Gamma_{12}(\Delta z) \right] \right\}. \quad (3.66)\end{aligned}$$

Äquivalent dazu lässt sich die Intensität am Ausgang (siehe auch Gl. 3.61) auch als Funktion von Ψ schreiben:

$$\mathcal{I}_A(\Delta z) = \frac{\mathcal{I}_0}{2} + \frac{\varepsilon_0 c}{4} \Re [\Gamma_{12}(\Delta z)] = \frac{\mathcal{I}_0}{2} + \frac{\varepsilon_0 c}{8\pi} \Re \left[\Psi(\Delta z) * \mathcal{FT}_{\kappa, \Delta z}^{-1} \left[\frac{d\omega}{d\kappa} \Big|_{\kappa} \right] \right]. \quad (3.67)$$

3.4 Optische Kohärenztomographie - OCT

Die optische Kohärenztomographie (OCT) ist ein Mikroskopieverfahren zur zerstörungsfreien dreidimensionalen Bildgebung [2, 3, 74–77]. Die OCT nutzt die in Kapitel 3.3 beschriebenen Beziehungen am Ausgang eines Interferometers, um die axiale Abbildung von der lateralen Abbildung zu entkoppeln. Dazu wird ein konventionelles Mikroskop, welches die laterale Auflösung gewährleistet, um einen interferometrischen Strahlengang ergänzt. Eine klassische Realisierung von OCT verwendet ein Michelson-Interferometer, in dem ein Spiegel durch die zu untersuchende Probe ersetzt wird (siehe Abb. 3.1). In

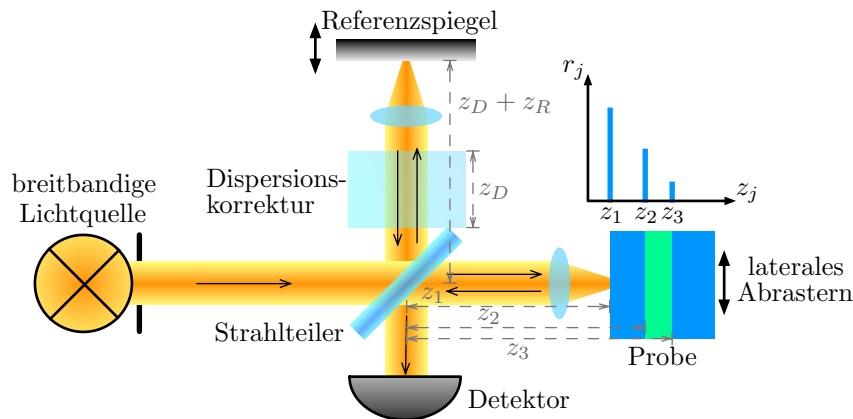


Abbildung 3.1: Prinzipieller Aufbau eines OCT-Gerätes: Ein Spiegel eines Michelson-Interferometers wurde durch die zu untersuchende Probe ersetzt. Die Probe wird hier als ein-dimensionales strukturiertes Schichtsystem mit den Reflektivitäten r_1 , r_2 und r_3 angenommen (blau). Die Länge des sog. Referenzarms kann geändert werden. Zusätzlich wurde ein Medium mit der Länge z_D zur Dispersionskompensation in den Referenzarm eingebracht. Interferenzen treten nur auf, wenn die Differenz der Laufzeiten in den Armen im Bereich der Kohärenzzeit der Lichtquelle liegt. Die laterale Abbildung erfolgt konventionell durch einen Rasterscan.

der Probe findet an Grenzflächen der Brechzahlverteilung Rückstreuung statt. Dieses rückgestreute Licht wird mit dem Licht des anderen Arms - in der OCT als Referenzarm bezeichnet - überlagert und zur Interferenz gebracht. Ist die Kohärenzzeit der verwendeten Lichtquelle kurz genug, kann die axiale Probenstruktur anhand der Interferenzeffekte rekonstruiert werden. Um die Funktionsweise von OCT zu verstehen, ist es sinnvoll, rein axial strukturierte Proben, also Schichtsysteme, zu betrachten. An den Grenzflächen zweier homogener Schichten mit unterschiedlicher Brechzahl kommt es zur Rückstreuung bzw. zur Reflexion. Deshalb kann eine solche Probe in Näherung als Ansammlung aufeinander gestapelter Spiegel mit den Feld-Reflektivitäten r_j und mit Abständen d_j den Schichtdicken entsprechend betrachtet werden. Die z -abhängige Reflektivität der Probe ist dann

$$r(z, \omega) = \sum_{j=1}^N r_j(\omega) \delta(z - z_j) \quad \text{mit} \quad d_j = z_{j+1} - z_j. \quad (3.68)$$

Diese Darstellung wird im Folgenden als OCT-Modell bezeichnet. Nimmt man weiterhin an, dass das einfallende Feld durch die Reflexionen nicht geändert wird und damit jede Reflexion unabhängig der vorhergehenden ist¹⁴, so ergibt sich die zeitliche Fourier-Transformation des Feldes im Probenarm E_P nach dem Durchlaufen der Probe zu

$$\begin{aligned} E_P(z_j, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} r(z', \omega) E(2z', \omega) dz' = \sum_{j=1}^N r_j(\omega) E(2z_j, \omega) \\ &= \sum_{j=1}^N r_j(\omega) E_0(\omega) e^{i\kappa_0 z_1} e^{i\kappa(\omega)(z_j - z_1)}. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Dabei ist z_1 die Länge des Probenarmes bis zur Oberfläche der Probe mit der in der gesamten Probe als gleich angenommenen Dispersion $\kappa(\omega) = \kappa_0 n(\omega)$ und $\kappa_0 = 2\omega/c$ die Dispersionsrelation im Vakuum. Zur Kompensation der Dispersion der Probe, kann in den Referenzarm ein Medium der Länge z_D mit der gleichen Dispersion wie die Probe eingebracht werden. Für das Feld nach Durchlaufen des Referenzarmes, der nur einen Reflektor r_R bei $z_R + z_D$ enthält, ergibt sich dann:

$$E_R(z_R + z_D, \omega) = r_R(\omega) E(2z_R + 2z_D, \omega) = r_R(\omega) E_0(\omega) e^{i\kappa_0 z_R} e^{i\kappa(\omega) z_D}. \quad (3.70)$$

Mit dem OCT-Modell können die hergeleiteten Beziehungen im Michelson-Interferometer ausgenutzt werden, um analog zu Kapitel 3.3.2 das Spektrum am Interferometerausgang zu berechnen (Es gilt weiterhin, dass die Dispersion überall in der Probe gleich ist

¹⁴also die Transmission der einzelnen Reflektoren 1 ist

$$\kappa(\omega) = 2k(\omega) = 2\omega n(\omega)/c).$$

$$\begin{aligned} S_A(\omega) &= \frac{\varepsilon_0 c \pi}{4} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \langle |E_{TR}(2z_1, \omega) + E_{TS}(2z_2, \omega)|^2 \rangle \\ &= \frac{\varepsilon_0 c \pi}{4} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \left\langle \left| E_{T0}(\omega) r_R(\omega) e^{i\kappa_0 z_R} e^{i\kappa(\omega) z_D} + \sum_{j=1}^N E_{T0}(\omega) r_j(\omega) e^{i\kappa_0 z_1} e^{i\kappa(\omega)(z_j - z_1)} \right|^2 \right\rangle \end{aligned} \quad (3.71)$$

Zur Herleitung der grundlegenden Prinzipien werden die Reflektivitäten im OCT-Modell zunächst als nicht frequenzabhängig und reell angenommen ($R_j = r_j^2$, $R_R = r_R^2$). Damit ergibt sich für das Spektrum

$$\begin{aligned} S_A(\omega) &= \frac{S_0(\omega)}{4} \left\{ \underbrace{R_R + \sum_{j=1}^N R_j}_{\text{konstante Terme}} + \underbrace{2 \sum_{j=1}^N \sqrt{R_R R_j} \cos [\kappa_0(z_R - z_1) + \kappa(\omega)(z_D - (z_j - z_1))]}_{\text{Kreuzkorrelationsterme}} \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{\sum_{j \neq l=1}^N \sqrt{R_j R_l} \cos [\kappa(\omega)(z_j - z_l)]}_{\text{Autokorrelationsterme}} \right\}. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Das Ausgangsspektrum ist also, neben einem konstanten Term eine modulierte Version des Spektrums der Lichtquelle. Die Modulationsfrequenzen sind maßgeblich bestimmt durch die Längendifferenzen von den Schichtpositionen und der Referenzarmlänge (Kreuzkorrelationsterme) und den Differenzen der Schichtpositionen untereinander (Autokorrelationsterme). Die Dispersion führt dazu, dass die tiefenabhängigen Modulationsfrequenzen nicht konstant in ω sind.

3.4.1 OCT im Frequenzbereich

Beim Blick auf die algebraische Form des Spektrums am Interferometerausgang 3.72 wird sofort klar, dass die axiale Struktur der Probe (also die Schichtpositionen und deren Reflektivitäten) durch eine Fourier-Transformation extrahiert werden kann. Wie bereits in Kapitel 3.3 gezeigt, verknüpft das Wiener-Khinchin-Theorem die Fourier-Transformation des Spektrums mit der Autokorrelationsfunktion. Analog zum einfachen Interferometer mit zwei Spiegeln (Gleichung 3.62) erhält man bei Fourier-Transformation des Ausgangsspektrums in ω um die Laufzeitdifferenzen verschobene Autokorrelationsfunktionen der Lichtquelle gefaltet mit einem Dispersionsterm. Es ist deshalb wiederum sinnvoll, die Fouriertransformation nicht in ω sondern in κ durchzuführen. Dazu muss aber die Dispersion der Probe vorher bekannt sein. Das typischerweise in ω oder in $\lambda = 2\pi/k$ (Wellenlänge)

gemessene Spektrum kann dann in ein κ -abhängiges Spektrum umgerechnet werden. Mit der Taylorentwicklung von ω ergibt sich für κ_0

$$\begin{aligned}\kappa_0 &= \frac{2}{c}\omega(\kappa) = \frac{2}{c} \left[\omega(\kappa_{\omega_0}) + \left. \frac{d\omega}{d\kappa} \right|_{\kappa_{\omega_0}} (\kappa - \kappa_{\omega_0}) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{d\kappa^2} \right|_{\kappa_{\omega_0}} (\kappa - \kappa_{\omega_0})^2 + \dots \right] \\ &= \frac{2}{c} \left. \frac{d\omega}{d\kappa} \right|_{\kappa_{\omega_0}} \kappa + \frac{2}{c} \mathcal{O}_{\kappa_{\omega_0}}(\kappa).\end{aligned}\quad (3.73)$$

Damit ergibt sich die Fourier-Transformation des Ausgangsspektrums in κ zu:

$$\begin{aligned}\Psi_A(\zeta) &= \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_A(\kappa) e^{i\kappa\zeta} d\kappa = \frac{1}{4} \left\{ \underbrace{\left[R_R + \sum_{i=1}^N R_i \right]}_{\text{„konstante“ Terme}} \Psi(\zeta) \right. \\ &\quad + \underbrace{\frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^N \sqrt{R_R R_j} \left\{ \Psi \left[\zeta - \left(\frac{2}{c} \left. \frac{d\omega}{d\kappa} \right|_{\kappa_{\omega_0}} (z_R - z_1) + z_D - (z_j - z_1) \right) \right] \right\}}_{\text{Kreuzkorrelationsterme}} \\ &\quad + \underbrace{\Psi \left[\zeta + \left(\frac{2}{c} \left. \frac{d\omega}{d\kappa} \right|_{\kappa_{\omega_0}} (z_R - z_1) + z_D - (z_j - z_1) \right) \right] * \mathcal{FT}_{\kappa, \zeta}^{-1} \left[e^{i \frac{2}{c} \mathcal{O}_{\kappa_{\omega_0}}(\kappa)(z_R - z_1)} \right]}_{\text{Kreuzkorrelationsterme}} \\ &\quad + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{j \neq l=1}^N \sqrt{R_j R_l} [\Psi[\zeta - (z_j - z_l)] + \Psi[\zeta + (z_j - z_l)]]}_{\text{Autokorrelationsterme}} \left. \right\}.\end{aligned}\quad (3.74)$$

Die Darstellung der Kreuzkorrelationsterme kann signifikant vereinfacht werden, indem entweder eine dispersionsfreie Probe mit $n = 1$ angenommen wird, oder die Referenzarmlänge auf die Probenarmlänge $z_R = z_1$ eingestellt wird. In beiden Fällen ergibt sich

$$\begin{aligned}\Psi_A(\zeta) &= \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_A(\kappa) e^{i\kappa\zeta} d\kappa = \frac{1}{4} \left\{ \underbrace{\left[R_R + \sum_{i=1}^N R_i \right]}_{\text{„konstante“ Terme}} \Psi(\zeta) \right. \\ &\quad + \underbrace{\sum_{j=1}^N \sqrt{R_R R_l} [\Psi[\zeta - (z_D + z_{R;1} - z_j)] + \Psi[\zeta + (z_D + z_{R;1} - z_j)]]}_{\text{Kreuzkorrelationsterme}} \left. \right\}\end{aligned}$$

$$+ \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{j \neq l=1}^N \sqrt{R_j R_l} [\Psi[\zeta - (z_j - z_l)] + \Psi[\zeta + (z_j - z_l)]]}_{\text{Autokorrelationsterme}} \Bigg\}. \quad (3.75)$$

Ist die Breite von $|\Psi(\zeta)|$ klein gegenüber den Schichtabständen, erscheinen die verschobenen Kopien von $\Psi(\zeta)$ getrennt voneinander und die axiale Struktur der Probe kann direkt aus den Kreuzkorrelationstermen abgelesen werden. Die maximal mögliche Auflösung ist folglich durch $|\Psi(\zeta)|$ festgelegt und ergibt sich damit aus der Bandbreite des zur Verfügung stehenden Spektrums [3, S.24ff]. Dieses Verfahren, bei dem das Spektrum am Interferometerausgang gemessen und dann Fourier-transformiert wird, heißt „Frequency-Domain OCT“¹⁵ oder kurz FD-OCT. Man unterscheidet je nach Art der Messung der spektralen Informationen die spektrometerbasierte OCT (SD-OCT) oder die „Swept-Source-OCT“ (SS-OCT). Bei der SD-OCT wird mit Hilfe eines Spektrometers und einer breitbandigen Lichtquelle das Spektrum am Ausgang aufgenommen. SS-OCT benötigt kein Spektrometer, da die spektralen Anteile sequenziell gemessen werden. Dafür muss eine monochromatische Lichtquelle spektral durchgestimmt und die Intensität für jede Wellenlänge aufgenommen werden. In Abb. 3.2 ist das FD-OCT Signal einer Probe mit 3 Grenzflächen exemplarisch für ein gaußförmiges Quellspektrum und demnach auch gaußförmiger Autokorrelationsfunktion für eine dispersionsfreie Probe gezeigt. Der

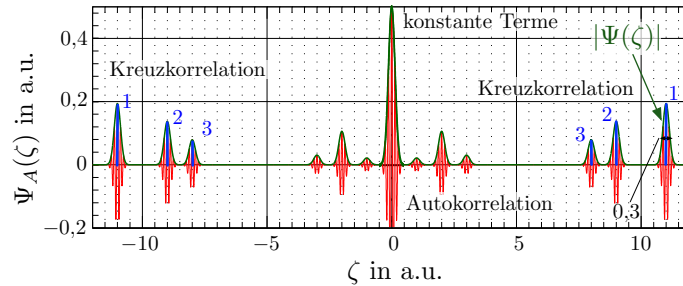


Abbildung 3.2: Realteil (rot) eines simulierten Signals einer FD-OCT-Messung: Anhand der Position der Maxima der Einhüllenden (grün) der Kreuzkorrelationsterme lassen sich die Tiefenstrukturinformationen der Probe ablesen (blau). Die Auflösung ist durch die Breite von $|\Psi(\zeta)|$ bestimmt. Als Beispiel wurde ein 3-fach Schichtsystem mit den Tiefen $z_1 = 1$, $z_2 = 3$ und $z_3 = 4$ sowie den Reflektivitäten $r_1 = 60\%$, $r_2 = 30\%$ und $r_3 = 10\%$ ausgewählt. Die Kohärenzlänge der gaußförmig abstrahlenden Quelle beträgt hier $\Delta\zeta_\Psi = 0,3$. Die Länge des Referenzarms wurde auf $z_R = 1$ und $z_D = 11$ eingestellt. Die Autokorrelationsterme tragen ebenfalls die Strukturinformationen, sind aber nicht eindeutig rekonstruierbar.

Verlauf der Einhüllenden der Kreuzkorrelationsanteile entspricht der axialen Probenstruktur. Die Position der Kreuzkorrelationsterme hängt im Gegensatz zum konstanten Term und den Autokorrelationstermen von der Länge des Referenzarms $z_D + z_R$ ab. Durch

¹⁵manchmal auch Fourier-Domain OCT

geeignete Wahl der Länge des Mediums im Referenzarm z_D können die Kreuzkorrelationssterme von den in der OCT typischerweise als Störung bzw. Rauschen betrachteten Autokorrelationstermen getrennt werden. Da mit zunehmender Differenz $z_D + z_R - z_j$ die Modulationsfrequenz des Spektrums der Kreuzkorrelation steigt, ist die maximal bzw. minimal einstellbare Referenzarmlänge durch die spektrale Auflösung des Detektors begrenzt. Die Autokorrelation enthält nicht nur die einzelnen Schichtabstände zur Oberfläche ($z_j - z_1$) sondern auch sämtliche Differenzen ($z_j - z_l$). Daraus kann die axiale Struktur im Allgemeinen nicht eindeutig rekonstruiert werden. Aufgrund der Komplexwertigkeit von Ψ in der FD-OCT nutzt man typischerweise die Einhüllende, also den Betrag, um die Tiefenstruktur darzustellen.

3.4.2 OCT im Zeitbereich

Wie vom Michelson-Interferometer (siehe Kapitel 3.3.2) bekannt, entspricht die zeitliche Autokorrelationsfunktion am Interferometerausgang $\Gamma_A(\tau)$ zur Zeit $\tau = 0$ der Intensität am Interferometerausgang. Für die zeitliche Autokorrelation gilt (siehe Gl. 3.62, 3.63 und 3.72):

$$\begin{aligned} \Gamma_A(\tau) = & \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_A(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega = \frac{1}{4} \left\{ \underbrace{\left[R_R + \sum_{i=1}^N R_i \right] \Gamma(\tau)}_{\text{„konstante“ Terme}} \right. \\ & + \underbrace{\frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^N \sqrt{R_R R_j} \left\{ \Gamma \left[\tau - \left(\frac{2}{c}(z_R - z_1) + \frac{d\kappa}{d\omega} \Big|_{\omega_0} (z_D - (z_j - z_1)) \right) \right]} \right\}}_{\text{Kreuzkorrelationsterme}} \\ & \quad \underbrace{* \mathcal{FT}^{-1} \left[e^{i\mathcal{O}_{\omega_0}(\omega)(z_D - (z_j - z_1))} \right]}_{\text{Kreuzkorrelationsterme}} \\ & + \underbrace{\Gamma \left[\tau + \left(\frac{2}{c}(z_R - z_1) + \frac{d\kappa}{d\omega} \Big|_{\omega_0} (z_D - (z_j - z_1)) \right) \right]}_{\text{Kreuzkorrelationsterme}} \underbrace{* \mathcal{FT}^{-1} \left[e^{i\mathcal{O}_{\omega_0}(\omega)(z_D - (z_j - z_1))} \right]}_{\text{Kreuzkorrelationsterme}} \left. \right\} \\ & + \underbrace{\frac{1}{4\pi} \sum_{j \neq l=1}^N \sqrt{R_j R_l} \left\{ \Gamma \left[\tau - \frac{d\kappa}{d\omega} \Big|_{\omega_0} (z_j - z_l) \right] \right\}}_{\text{Autokorrelationsterme}} \\ & \quad \underbrace{* \mathcal{FT}_{\omega, \tau}^{-1} \left[e^{i\mathcal{O}_{\omega_0}(\omega)(z_j - z_l)} \right]}_{\text{Autokorrelationsterme}} \\ & \quad + \underbrace{\Gamma \left[\tau + \frac{d\kappa}{d\omega} \Big|_{\omega_0} (z_j - z_l) \right] \left\{ \mathcal{FT}_{\omega, \tau}^{-1} \left[e^{-i\mathcal{O}_{\omega_0}(\omega)(z_j - z_l)} \right] \right\}}_{\text{Autokorrelationsterme}} \left. \right\}. \quad (3.76) \end{aligned}$$

Wird die Intensität am Ausgang nun für verschiedene z_R gemessen, erhält man das Interferogramm

$$\mathcal{I}_A(z_R) = \frac{\varepsilon_0 c}{2} \Gamma_A(\tau = 0; z_R). \quad (3.77)$$

Die Darstellung für den dispersiven Fall ist im allgemeinen kompliziert und müsste analog zu Gleichung 3.55 berechnet werden. Für eine dispersionsfreie Probe ($\kappa = 2\omega n/c$ mit $n = 1$) lässt sich das Interferogramm jedoch einfach darstellen:

$$\mathcal{I}_A(z_R) = \frac{\varepsilon_0 c}{8} \left\{ \underbrace{\left[R_R + \sum_{i=1}^N R_i \right] \Gamma(0)}_{\text{„konstante“ Terme}} + \underbrace{2 \sum_{j=1}^N \sqrt{R_R R_j} \Re \left[\Gamma \left[\frac{2}{c} (z_R + z_D - z_j) \right] \right]}_{\text{Kreuzkorrelationsterme}} + \underbrace{\sum_{j \neq l=1}^N \sqrt{R_j R_l} \Re \left[\Gamma \left[\frac{2}{c} (z_l - z_j) \right] \right]}_{\text{Autokorrelationsterme}} \right\}. \quad (3.78)$$

Dieses reellwertige Signal enthält ebenfalls die komplette axiale Strukturinformation der Probe, da auch hier verschobene Kopien der Kohärenzfunktion bei den jeweiligen zu den Schichttiefen gehörenden Laufzeitdifferenzen auftreten. Die Autokorrelationsterme hängen nicht von z_R ab und tragen deshalb nur einen konstanten Anteil bei. Dieses Verfahren wird als Time-Domain OCT oder kurz TD-OCT bezeichnet. Ein entsprechendes exemplarisches Signal für dieselbe Probe und dasselbe Eingangsspektrum wie in Kap. 3.4.1 ist in Abb. 3.3 gezeigt. Der Vorteil von TD-OCT liegt darin, dass kein Spektrometer benötigt wird

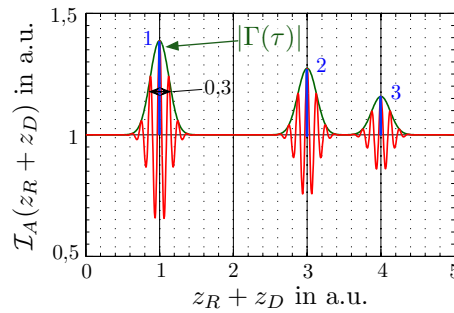


Abbildung 3.3: Simuliertes Signal einer TD-OCT-Messung (rot): Anhand der Positionen der Maxima der Einhüllenden (grün) lassen sich die Tiefenstrukturinformationen der Probe ablesen (blau). Die Auflösung ist durch die Breite von $|\Gamma(\tau)|$ bestimmt. Als Beispiel wurde wie in Abb. 3.2 ein 3-fach Schichtsystem mit den Tiefen $z_1 = 1$, $z_2 = 3$ und $z_3 = 4$ sowie den Reflektivitäten $r_1 = 60\%$, $r_2 = 30\%$ und $r_3 = 10\%$ ausgewählt. Die Kohärenzlänge der gaußförmig abstrahlenden Quelle beträgt auch hier $\Delta\zeta_\Gamma = 0,3$. Das gezeigte Signal gilt für eine *dispersionsfreie* Probe und wurde simuliert, indem die Intensität am Ausgang des Interferometers in Abhängigkeit der Referenzarmlänge $z_R + z_D$ bestimmt wurde.

und das Messsignal direkt ohne weitere Datenbearbeitung die axiale Probenstruktur zeigt.

Dafür muss jedoch die Länge des Referenzarmes gescannt werden (mit allen damit verbundenen Nachteilen wie geringe Sensitivität, höheres Signal-Rauschverhältnis, Stabilität und Messdauer [78, 79]), was bei der FD-OCT nicht notwendig ist.

3.4.3 Laterale Abbildung

Die laterale Abbildung in einem OCT-Gerät erfolgt meist konventionell. Dazu wird das Licht mit einem Objektiv auf die Probe fokussiert. So wird das axiale Signal dieser lateralen Position entweder im TD-OCT- oder im FD-OCT-Verfahren aufgenommen. Durch einen zweidimensionalen lateralen Rasterscan können dann dreidimensionale Abbildungen erzeugt werden [3, S.24ff]. Es ist aber auch möglich, die laterale Struktur durch eine Abbildung auf einen zweidimensionalen Detektor (Kamera) aufzunehmen. Dieses Verfahren heißt Full-Field OCT [80]. Die axiale Struktur kann dann entweder durch TD-OCT oder durch SS-OCT abgebildet werden.

3.4.4 Auflösung

Die laterale Auflösung von OCT, also der Abstand zweier lateraler Punkte, die noch aufgelöst werden können, hängt wie im konventionellen Mikroskop von der numerischen Apertur ($NA = n \sin \alpha$ mit α dem halben Öffnungswinkel des Objektivs) der fokussierenden Optik ab [21][71, S.133f].

$$d_{xy} \geq \frac{1,22\lambda}{2NA} \quad (3.79)$$

In konventionellen Mikroskopen kann die axiale Struktur abgebildet werden, indem die Fokusebene durch die Probe gefahren wird. Da jedoch die Schärfentiefe vom Quadrat der numerischen Apertur abhängt, ist die axiale Auflösung solcher Verfahren insbesondere bei geringer NA sehr begrenzt.

$$d_z \geq \frac{2\lambda n}{NA^2} \quad (3.80)$$

Bei OCT ist die axiale Auflösung hingegen unabhängig von der NA und ist hauptsächlich durch die Kohärenzfunktion der verwendeten Lichtquelle definiert. Dies ist ein entscheidender Vorteil von OCT gegenüber konfokalen Ansätzen. Deshalb ist die OCT sehr gut geeignet für Anwendungen mit hohen Anforderungen an die axiale Auflösung aber kleiner NA. Beispielsweise ist die NA und damit die axiale Auflösung konfokaler Systeme bei der dreidimensionalen Abbildung der Netzhaut des Auges durch die Pupille und den Augendurchmesser beschränkt. Unter anderem deshalb wird die OCT sehr erfolgreich in der Ophthalmologie eingesetzt [3, 81]. Die axiale Auflösung von OCT hängt von der Kohärenzzeit der Lichtquelle $\Delta\tau_K$, also der Breite der Kohärenzfunktion $\Gamma(\tau)$ ab. Definiert

man zwei Schichten als gerade noch auflösbar, wenn ihr zugehöriger Laufzeitunterschied gerade der FWHM-Breite des Kohärenzgrades entspricht, ergibt sich für den Abstand der Schichten die Auflösungsbedingung in dispersionsfreien Medien

$$\Delta z = z_i - z_j \geq \frac{c}{2n} \Delta \tau_K. \quad (3.81)$$

Für ein gaußförmiges Quellspektrum mit der Halbwertsbreite $\Delta \omega_G$ gilt dann durch das Wiener-Kchinchin-Theorem

$$\Delta z \geq \frac{4c \ln 2}{n \Delta \omega_G} \approx 2,77 \frac{c}{n \Delta \omega_G}. \quad (3.82)$$

Ist $\lambda_0 = 2\pi c / (n\omega_0)$ die Zentralwellenlänge und $\Delta \lambda_G$ die spektrale Breite der Lichtquelle und gilt weiterhin $\lambda_0 \gg \Delta \lambda_G$, kann die Auflösung auch in Abhängigkeit der Wellenlänge angegeben werden.

$$\Delta z \geq \frac{2 \ln 2}{n\pi} \frac{\lambda_0^2}{\Delta \lambda_G} \approx 0,44 \frac{\lambda_0^2}{n \Delta \lambda_G} \quad (3.83)$$

Ist die Probe dispersiv, verschlechtert sich durch die hinzukommenden Frequenzen im Ausgangsspektrum (Gl. 3.72) im Allgemeinen die Auflösung. Der konstante Anteil der Brechzahl $n(\omega_0)$, wenn er größer als 1 ist, verbessert jedoch die Auflösung, weil sich die Laufzeit entsprechend verlängert. Zur Kompensation von auflösungsverschlechternden Dispersionseffekten gibt es verschiedene Methoden. Die naheliegendste Methode ist, wie gezeigt, in den Referenzarm ein Material mit derselben Dispersion wie die Probe einzubringen und die Armlängen abzugleichen. Durch eine Transformation in den κ -Raum bei bekannter Dispersion kann dann das Tiefensignal bei SD-OCT von den Disperionseffekten entfaltet werden. Ähnliche Verfahren, die aus dem Interferogramm das Spektrum berechnen und dann die Dispersion heraus falten, gibt es auch für TD-OCT [3, S.54ff]. Eine Messung der Tiefenstruktur an einem einzelnen lateralen Punkt wird in der OCT als A-Scan bezeichnet. Kommt durch einen Rasterscan über viele Punkte laterale Information hinzu, wird dies als B-Scan bezeichnet. Schnittbilder durch mit OCT aufgenommene Tomogramme in einer Tiefenebene heißen En-Face-Scans [3, S.2ff].

3.5 Strahlungsquellen im extrem ultravioletten Spektralbereich

Aufgrund der in Kapitel 2 beschriebenen speziellen Eigenschaften der XUV-Strahlung ist auch ihre Erzeugung technologisch aufwendig [22]. Lange Zeit waren Synchrotrons die einzig verfügbaren Strahlungsquellen, die einen hohen Photonenfluss im XUV liefern konnten [56]. Mit der Entwicklung der Hochintensitätslaser [82] und der Erforschung von nichtlinearen Konversionsprozessen wie der Erzeugung hoher Harmonischer [4] (siehe

Abschnitt 3.5.2) können, zumindest im Bereich bis 100 eV, auch im Labormaßstab für Bildgebungsanwendungen ausreichend hohe Photonenflüsse generiert werden. Da eine detaillierte Formulierung der Funktionsweise der XUV-Quellen für das Verständnis der Inhalte dieser Arbeit nicht notwendig ist, werden im Folgenden die Prinzipien der verwendeten Strahlungsquellen nur in kurzer Form dargestellt. Für eine umfassende Beschreibung wird auf die im Folgenden angegebene Literatur verwiesen.

3.5.1 Synchrotron-Quellen

In einem Synchrotron werden geladene Teilchen, meist Elektronen oder Positronen, mit relativistischen Geschwindigkeiten mit Hilfe von Magneten auf einer stabilen Kreisbahn gehalten. Indem die bewegten Ladungsträger gezielt beschleunigt werden, werden sie zur Abstrahlung angeregt [22, 56]. Dies geschieht beispielsweise an den für die Kreisbahn notwendigen Umlenkmagneten selbst („Bending-Magnet-Strahlung“) oder in speziellen periodischen magnetischen Strukturen wie Wiggler oder Undulatoren. In ihnen werden die geladenen Partikel auf oszillierende Bahnen abgelenkt. Dadurch lässt sich eine schmalbandige Emission von Strahlung erreichen. Die Wellenlänge der emittierten Strahlung reicht vom Terahertzbereich bis hin zur harten Röntgenstrahlung, je nach Ausgestaltung der magnetischen Strukturen und des Synchrotrons selbst. Die Lorentzkontraktion, die durch die relativistischen Geschwindigkeiten auftritt, sorgt dafür, dass die erzeugte Strahlung nur in einem engen Kegel in Vorwärtsrichtung abgestrahlt wird. Die erzeugte Strahlung wird typischerweise noch spektral gefiltert, da die Schmalbandigkeit der direkten Emission für die Experimente meist nicht ausreichend ist. An einem Synchrotron sind für gewöhnlich viele unterschiedliche Strahlungsquellen (Wiggler, Undulatoren und Umlenkmagnete) für verschiedene Bereiche und Anwendungen an einzelnen Strahlrohren („Beamlines“) untergebracht, sodass mehrere Experimente gleichzeitig durchgeführt werden können. Da Synchrotrons aufgrund des enormen technologischen Aufwands typischerweise als Großforschungseinrichtung betrieben werden, ist die Verfügbarkeit dieser Strahlungsquellen stark begrenzt. Insbesondere für die breite Einsetzbarkeit von mikroskopischen Methoden wie der hier vorgestellten XCT sind laborbasierte Alternativen deshalb unverzichtbar.

3.5.2 Erzeugung hoher Harmonischer

Wird ein Laserpuls mit hoher Intensität ($\approx 10^{13} \text{ W/cm}^2$) in ein geeignetes Gas fokussiert, werden durch nichtlineare Frequenzkonversion hohe Harmonische der Grundfrequenz des Lasers ω_L , welche typischerweise im Infrarotbereich liegt, bis in den XUV-Bereich hinein erzeugt. Die Konversionseffizienz, insbesondere der höheren harmonischen Ordnungen, liegt dabei weit höher, als ursprünglich erwartet wurde [4, 83–85]. So existiert nach einem Bereich mit exponentiellem Abfall ein Plateau mit nahezu gleichbleibender Intensität der

Harmonischen und ein sog. Cut-off-Bereich überhalb dem keine weiteren Harmonischen emittiert werden (siehe Abb. 3.4a). Der Prozess wird als „High-Harmonic-Generation“ (HHG) bezeichnet. In den frühen 90er Jahren wurde von Corkum, Kulander und anderen

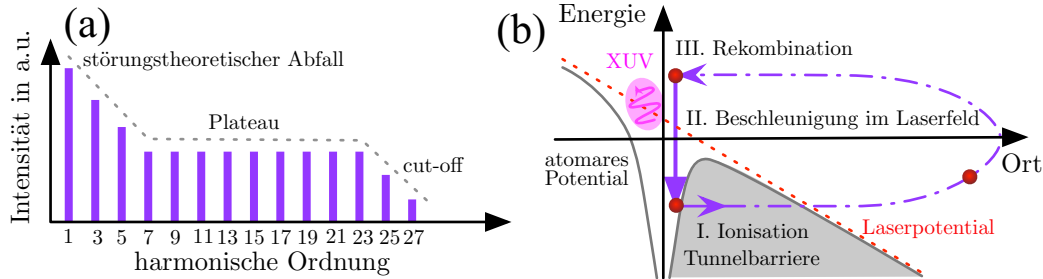


Abbildung 3.4: Hohe Harmonische und 3-Stufen-Modell: (a) zeigt den typischen Verlauf hoher Harmonischer. Nach einem störungstheoretischen Abfall kommt ein Plateau-Bereich, in dem die Intensität der Harmonischen näherungsweise gleich bleibt. Dann schließt sich ein scharfer „cut-off“ an, über dem keine weiteren Harmonischen abgestrahlt werden. (b) zeigt eine schematische Darstellung des 3-Stufen-Modells. Das Laserfeld verzerrt das atomare Potential, sodass ein Elektron durch die sich bildende Potentialbarriere tunnelt (I). Danach wird es im Laserfeld beschleunigt (II) und kann, wenn der Ionisationszeitpunkt und die damit festgelegte Trajektorie es zulassen, mit dem Mutterion rekombinieren (III) und dabei ein XUV-Photon aussenden.

[86, 87] ein semiklassisches 3-Stufen-Modell entwickelt, welches den Entstehungsprozess und die Eigenschaften des HHG-Prozesses erklärt. Dazu wird der Prozess in drei Teile gegliedert, die separat betrachtet werden und nicht direkt wechselwirken können (siehe Abb. 3.4b).

I. Ionisation

Die Feldstärke des hochintensiven Laserpulses führt dazu, dass sich das Potential, in dem das äußere Elektron der Gasatome an den Atomkern gebunden ist, verbiegt. Je nach Wellenlänge und Laserintensität lassen sich verschiedene Mechanismen identifizieren, wie das Elektron vom Laserfeld ionisiert werden kann, obwohl die Photonenenergie des Lasers $\hbar\omega_L$ für die direkte Ionisation wesentlich zu niedrig ist. Neben der direkten Feldionisation (Potential wird soweit verzerrt, dass keine Bindung mehr gegeben ist) können mit dem Keldysh-Parameter [88]

$$\gamma = \sqrt{\frac{I_P}{2U_P}} \quad (3.84)$$

zwei Ionisationsmechanismen unterschieden werden. Dabei ist I_P das Ionisationspotential des ungestörten Gasatoms und $U_P = \frac{e^2 E_0^2}{4m_e \omega_L^2}$ das ponderomotive Potential. Letzteres beschreibt die mittlere kinetische Energie eines Elektrons in einem monochromatischen Laserfeld mit der Feldamplitude E_0 . Ist bei geringen Intensitäten oder kurzen Wellenlängen $\gamma \gg 1$, so wird das Elektron durch Multiphotonenionisation frei. Bei höheren Intensitäten

oder langen Wellenlängen, also bei $\gamma \ll 1$, wird das Elektron ionisiert, da es durch einen sich öffnenden Potentialwall quantenmechanisch tunneln kann. Die Ionisationsrate lässt sich dann durch die sog. ADK-Rate [89] errechnen. Die Ionisationsrate ist umso höher, je größer die momentane Feldstärke ist. Während eines optischen Zyklus werden also jeweils zu Zeiten um die beiden Maxima der Feldstärke die meisten Elektronen ionisiert.

II. Beschleunigung im Laserfeld

Nachdem das Elektron ionisiert wurde, wird im 3-Stufen Modell der Einfluss des Potentials des Mutterions im einfachsten Fall komplett vernachlässigt. Zusätzlich wird angenommen, dass die Geschwindigkeit des Elektrons im Moment nach der Ionisation $v_0 = 0$ ist. Es kann dann eine klassische Trajektorie im oszillierenden Laserfeld ausgerechnet werden, deren Verlauf nur vom Zeitpunkt der Ionisation im Verhältnis zum Laserpuls (Phase) abhängt.

III. Rekombination

Bei linearer (oder entsprechend gewählter anderer geeigneter) Polarisierung des Laserfeldes existieren Trajektorien, auf denen das Elektron zum Mutterion zurückkehrt. Die kinetische Energie des Elektrons zum Zeitpunkt der Rückkehr hängt dabei wiederum nur von der Ionisationszeit des Elektrons ab. Bei der Rückkehr kann das Elektron entweder an der Ionenhülle elastisch oder inelastisch gestreut werden oder es rekombiniert unter Aussendung von Strahlung¹⁶. Letzteres ist die Ursache für die Aussendung von XUV-Strahlung, da sich die emittierte Photonenenergie aus der Summe von Ionisationspotential und kinetischer Energie bei der Rückkehr zusammensetzt ($\hbar\omega = I_P + E_{\text{kin}}$). Die maximale Photonenenergie ist dabei durch die maximale Energie vorgegeben, die ein Elektron im Laserfeld (bei Rückkehr) aufnehmen kann. Es ergibt sich somit aus dem 3-Stufen-Modell sofort die Cut-off-Energie der hohen Harmonischen

$$\hbar\omega_{\text{cut-off}} = I_P + 3,17 U_P. \quad (3.85)$$

Da die Ionisationswahrscheinlichkeit nur in Umgebung der maximalen Feldstärke des Laserpulses hoch ist, findet der Prozess der Beschleunigung und Rekombination zweimal pro Laserzyklus statt. Es wird jeweils ein XUV-Puls ausgesendet, dessen Dauer signifikant unterhalb der Periodendauer des Lasers liegt (Attosekundenbereich). Sämtliche ausgesandten XUV-Pulse bilden einen zeitlichen Pulszug mit der doppelten Laserfrequenz [90]. Spektral entspricht dies einer Kammstruktur mit Maxima bei den ungeraden Vielfachen

¹⁶Je nach Wirkungsquerschnitt haben die Prozesse unterschiedliche Wahrscheinlichkeiten. Der wahrscheinlichste Fall ist, dass das Elektron bei der Rückkehr überhaupt nicht wechselwirkt.

der Grundfrequenz. Dadurch ergibt sich die charakteristische Struktur ungerader Harmonischer bei HHG. Je länger der treibende Laserpuls ist, desto länger wird der Pulszug und umso schärfer die spektrale Kammstruktur (einzelne Harmonische wird schmaler). Je kürzer der Laserpuls ist, desto unschärfer bildet sich die Harmonischenstruktur heraus (einzelne Harmonische wird breiter). Bei Pulsen mit nur wenigen optischen Zyklen können so isolierte Attosekundenpulse freigesetzt werden, welche ein kontinuierliches breites Spektrum im XUV-Bereich besitzen [11, 91–93].

Alle wesentlichen Eigenschaften der HHG-Strahlung können also durch das 3-Stufen-Modell erklärt werden. Ein rigoroses quantenmechanisches Modell, auf welches hier aber nicht eingegangen wird, wurde wenig später entwickelt [94].

Phasenanpassung

Das 3-Stufen-Modell beschreibt die Aussendung hoher Harmonischer eines einzelnen Atoms. Für eine makroskopische Konversion muss jedoch, wie bei anderen nichtlinearen Effekten auch, Phasenanpassung im Interaktionsvolumen erreicht werden, damit die einzelnen atomaren Emittoren konstruktiv interferieren. Dies kann bei gegebener Intensität, Fokussiergeometrie und Gasart durch das Variieren des Gasdruckes im Interaktionsvolumen geschehen [95]. Eine genaue Beschreibung der Phasenanpassungsbedingungen bei HHG ist zum Verständnis dieser Arbeit nicht notwendig.

Die letztendlich erzeugte XUV-Strahlung behält durch den Konversionsprozess die kohärenten Eigenschaften des Lasers insbesondere hinsichtlich der räumlichen Kohärenz. Die XUV-Strahlung wird typischerweise mit einem Drittel der Divergenz des fokussierten Lasers ausgesendet [96, 97]. Die räumliche Kohärenz ist ein wesentlicher Vorteil gegenüber Synchrotronquellen, bei denen räumliche Kohärenz nur durch den Einsatz von Lochblenden mit enormen Verlusten hinsichtlich des Photonenflusses hergestellt werden kann.

Ein Nachteil des HHG-Prozesses ist seine geringe Konversionseffizienz ($< 10^{-5}$) [95, 98, 99]. Mit zunehmender XUV-Photonenenergie fällt sie ab. Um für Anwendungen wie beispielsweise die Bildgebung ausreichend Photonen zu erzeugen, müssen entsprechend Laser mit hohen Durchschnittsleistungen verwendet werden [31].

4 OCT im extrem ultravioletten Spektralbereich - XCT

Kohärenztomographie ist im infraroten Spektralbereich ein etabliertes Verfahren zur dreidimensionalen Bildgebung. OCT nutzt breitbandige Strahlung mit entsprechend kurzer Kohärenzlänge, um axiale Auflösung, also Tiefenauflösung interferometrisch zu generieren (siehe Kap. 3.4). Laterale Auflösung wird typischerweise durch konventionelle Abbildung erreicht und ist entsprechend durch die numerische Apertur (NA) der abbildenden Optik begrenzt. Die Unabhängigkeit der Tiefenauflösung von der numerischen Apertur ist ein prinzipieller und entscheidender Unterschied zu allen in Abschnitt 2.2 vorgestellten anderen XUV-Mikroskopiemethoden. Dreidimensionale Abbildungen lassen sich bei diesen Verfahren entweder durch ein schichtweises Abtasten mit einem durch die Fokussierung in der Tiefe begrenzten Fokussvolumen (Scanning-Verfahren) oder durch die tomographische Rekonstruktion von mehreren unter verschiedenen Winkeln aufgenommenen zweidimensionalen Projektionen der Probe erzeugen (Radon-Transformation). Die Tiefenauflösung beim Scanning-Verfahren hängt im Gegensatz zur lateralen Auflösung sogar quadratisch von der numerischen Apertur ab (siehe Gl. 3.80). Dies ist besonders im XUV-Bereich problematisch, da, wie bereits beschrieben, die erreichbare numerische Apertur stark begrenzt ist bzw. nur mit großem technischen und finanziellen Aufwand vergrößert werden kann. Folglich ist die axiale Auflösung im XUV typischerweise sehr gering. Sie könnte zwar durch den Einsatz von Lochblenden verbessert werden (Konfokalmikroskopie), jedoch würde dadurch sehr viel Photonenfluss verloren gehen. Daher werden zur dreidimensionalen Abbildung im XUV-Bereich bisher fast ausschließlich tomographische Methoden verwendet. Da dort die Probe unter mehreren Winkeln lateral abgebildet wird, ist die erreichbare axiale Auflösung letztlich durch die laterale Auflösung begrenzt, hängt also linear von der numerischen Apertur ab. Durch die Rotation der Probe und die Anzahl der notwendigen Projektionen ist diese Methode im Allgemeinen aber sehr zeitintensiv.

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte, bzw. weiter entwickelte optische Kohärenztomographie im XUV Bereich, oder kurz XCT, generiert die axiale Auflösung aus der Bandbreite der verwendeten Strahlungsquelle und löst damit gleich mehrere Probleme. Der ohnehin vorhandene und mit konventionellen Methoden nicht genutzte sehr breitbandige Photonenfluss von laborbasierten XUV-Quellen kann nun direkt ausgenutzt werden, um axiale Auflösungen im Nanometerbereich zu erzeugen. Die hohe Tiefenauflösung ist damit entkoppelt von der NA der fokussierenden Optik und steht auch bei den im XUV-Bereich typischerweise kleinen verwendeten numerischen Aperturen in vollem Umfang zur Verfügung. XCT mit kleiner NA ist daher insbesondere geeignet, um schichtartige Proben, deren charakteristische axiale Struktur wesentlich kleiner ist als die laterale, zu untersuchen. Damit eröffnen sich unter anderem Anwendungen in der dreidimensio-

nenalen Untersuchung von (Mehrlagen-)Beschichtungen beispielsweise von optischen oder XUV-Spiegeln, funktionalen axialen Strukturen in Solarzellen oder axial strukturierten Halbleitern (Graphen-basierte Elektronik) oder auch biologischen lateral homogenen Membranen. XCT mit hoher NA und damit Nanometerauflösung in allen Raumdimensionen hat noch ein wesentlich größeres Anwendungspotential beispielsweise in der Untersuchung von Halbleiterstrukturen, lithografischer Masken oder der Abbildung von biologischen Strukturen mit den im XUV-Bereich vorteilhaften und einzigartigen Bildentstehungskontrasten. Aufgrund des großen Aufwands und der hohen Kosten, welche mit hoher NA im XUV verbunden sind, konzentriert sich diese Arbeit auf die Entwicklung und Untersuchung von XCT mit kleiner NA. Ausgehend von den gewonnenen Erkenntnissen wurden aber bereits mehrere Projekte initiiert, um die numerische Apertur und damit die laterale Auflösung zu erhöhen. Die grundlegenden Ideen dazu werden in Kapitel 8 näher erläutert.

Da XCT, wie alle OCT-Verfahren, auf Rückstreuung beruht, können Proben quasi-zerstörungsfrei¹⁷, in Reflexionsgeometrie untersucht werden. Da keine dünnen Schichten angefertigt werden müssen, ist der Präparationsaufwand damit sehr gering. Bisherige tomographische Verfahren im XUV, welche auf Projektionen unter verschiedenen Winkeln beruhen, arbeiten typischerweise in Transmissionsgeometrie und sind damit auf dünne Proben beschränkt. XCT hingegen bietet auch die Möglichkeit oberflächennahe Strukturen von dicken Proben dreidimensional abzubilden, ohne die Probe drehen oder schneiden zu müssen.

4.1 Konzept von XCT

Die speziellen Gegebenheiten im XUV [22] machen eine direkte Übertragung des bekannten OCT-Verfahrens im Infraroten in den XUV-Bereich unmöglich. Stattdessen muss die Methode konzeptionell sowie technisch weiter entwickelt und angepasst werden. Durch die starke Absorption im XUV ist es notwendig, wie bei allen anderen XUV-Mikroskopiemethoden auch, den kompletten Aufbau unter Vakuum zu betreiben. Ein interferometrischer Aufbau im XUV-Bereich, wie er für eine direkte Übertragung von OCT notwendig wäre, müsste, aufgrund der hohen erreichbaren axialen Auflösung, eine mechanische Stabilität der Armlängen von wenigen Nanometern garantieren. Dies ist technisch nur mit großem Aufwand zu realisieren. Des Weiteren müsste ein potentieller Strahlteiler im XUV sehr breitbandig sein und sollte ein über die Bandbreite gleichbleibendes Teilungsverhältnis besitzen. Außerdem sollte die Wellenfront bei Reflexion am

¹⁷Da für XCT XUV-Strahlung verwendet wird, werden die Materialien in der Probe, wie bei allen XUV-Mikroskopiemethoden ionisiert. Bei genügend hohen Flüssen und Messdauern, kann es deshalb je nach Probe zu bleibenden strahlungsinduzierten Schäden kommen.

Strahlteiler nicht zu stark deformiert werden, um die Fokussierbarkeit der Strahlung zu erhalten. Dazu müsste die Formtreue der Oberfläche ebenfalls im Bereich weniger Nanometer liegen. Aufgrund der hohen Absorption darf der Strahlteiler über die gesamte Fläche je nach Material außerdem nicht dicker sein als ein paar hundert Nanometer. Experimente mit einem monochromatischen Michelson-Interferometer mit einer von der Vorder- und Rückseite beschichteten dünnen Membran als Strahlteiler [100] zeigten, dass die obigen Anforderungen nicht zusammen erfüllbar sind - zumindest nicht auf lateralen Skalen im Bereich der Ausdehnung des kollimierten Lichtes. Deshalb wurde XCT als Variante eines Common-Path-OCT-Aufbaus [101] konzipiert. Dabei wird auf den problematischen Interferometeraufbau komplett verzichtet, indem die Oberfläche der Probe selbst als Referenz genutzt wird [1]. Dies hat einen entscheidenden Vorteil. Die für OCT notwendigen Interferenzen treten nun zwischen der Oberfläche und den tieferen Probenstrukturen auf. So gesehen, ist die Probe selbst ein mechanisch intrinsisch stabiles Interferometer, und Referenzarm sowie Strahlteiler sind nicht mehr notwendig. Die technische Umsetzung wird damit möglich bzw. entscheidend vereinfacht [7, 40]. Durch die nicht veränderbare Referenz (Oberfläche) ist allerdings Time-Domain OCT, also ein axiales Abtasten durch die Bewegung des Referenzspiegels, nicht möglich. XCT kann demnach nur als Fourier-Domain-OCT-Variante funktionieren und somit nur als spektrometerbasierte OCT oder als Swept-Source-OCT umgesetzt werden. Der stark vereinfachte Aufbau von XCT hat jedoch auch einen erheblichen Nachteil. Die Interferenzen, welche die Tiefeninformation der Probe tragen, entstehen nicht nur zwischen der Oberfläche und den darunter liegenden Strukturen, sondern auch zwischen den tieferen Strukturen untereinander. Es tauchen im Signal also neben den Abständen der Strukturen zur Oberfläche auch sämtliche Abstände der Strukturen zueinander auf. Eine eindeutige Rekonstruktion der axialen Struktur ist dann nicht mehr ohne Weiteres möglich. Im Kontext des Fourier-Domain-OCT-Konzeptes (siehe Kap. 3.4.1) wird der Sachverhalt noch klarer. Die Kreuzkorrelationsterme fehlen bei XCT komplett, da kein ausgezeichneter Referenzspiegel vorhanden ist. Stattdessen besteht das Signal nur aus den konstanten Termen und den mehrdeutigen Autokorrelationstermen, die bei OCT normalerweise als Störsignale gelten und nicht verwendet oder herausgefiltert werden. Die eindeutige Rekonstruktion der axialen Struktur aus der Autokorrelation ist ein wesentlicher Bestandteil dieser Arbeit und wird in Kapitel 6 ausführlich behandelt.

Lässt man die Mehrdeutigkeiten, die durch die Autokorrelation entstehen, erst einmal unberücksichtigt, wird klar, dass die Eigenschaften von OCT hinsichtlich der erreichbaren axialen Auflösung bei XCT vollständig erhalten bleiben. Die axiale Auflösung verhält sich umgekehrt proportional zur nutzbaren Frequenz-Bandbreite des Lichtes (siehe Gl. 3.82)¹⁸.

¹⁸Der quadratische Zusammenhang im Wellenlängenbereich zwischen der Zentralwellenlänge und der axialen Auflösung (siehe Gl. 3.83) gilt im XUV streng genommen nicht mehr. Trotzdem wird ersichtlich, dass eine Verkleinerung der Zentralwellenlänge die axiale Auflösung von OCT überproportional steigen lässt.

Die nutzbaren Frequenzbandbreiten sind im XUV wesentlich größer als im infraroten oder sichtbaren Spektralbereich. Bei der Übertragung von OCT in den XUV Bereich verbessert sich die axiale Auflösung so um bis zu drei Größenordnungen auf wenige Nanometer. Die maximal erreichbare Auflösung hängt dabei natürlich einerseits von der Bandbreite der verwendeten Lichtquelle ab. Andererseits spielt im XUV die Absorption der Probe eine wesentlich dominantere Rolle als im Sichtbaren, sodass die tatsächlich nutzbare effektive Bandbreite, mit der eine ausreichende Eindringtiefe in die Probe gewährleistet werden kann, von den spektralen Transmissionsfenstern der in der Probe vorkommenden Materialien abhängt. In Kapitel 2 wurden mit dem Siliziumtransmissionsfenster zwischen 30 eV – 99 eV und dem Wasserfenster von 277 eV – 525 eV mit Eindringtiefen von einigen Mikrometern in Silizium bzw. biologische Materialien zwei wichtige anwendungsrelevante Bereiche eingeführt. Die theoretisch maximal erreichbare axiale Auflösung von XCT beträgt im Siliziumfenster ca. 11 nm und im Wasserfenster 3 nm. Abbildung 4.1 zeigt schematisch die experimentelle Umsetzung von XCT [7]. Breitbandige XUV-Strahlung

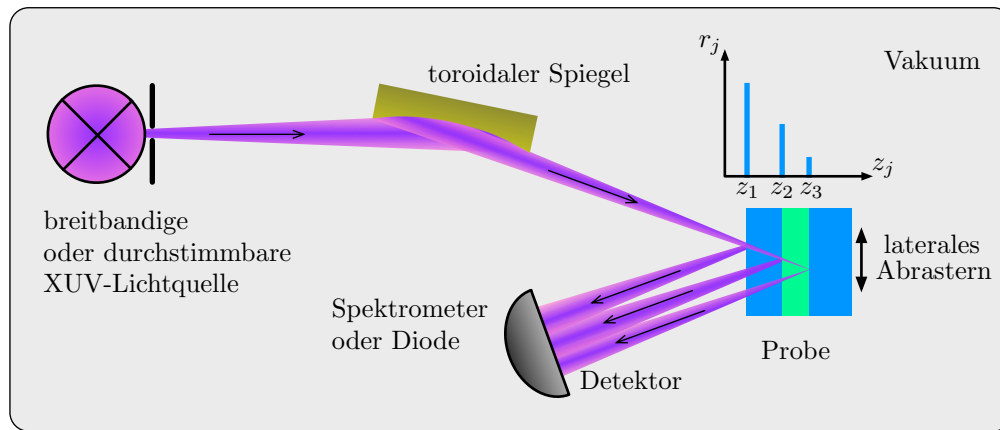


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der Realisierung von OCT im XUV-Bereich: Aufgrund der starken Absorption muss der komplette Aufbau im Vakuum betrieben werden. Die breitbandige XUV-Strahlung wird mit einem toroidalen Spiegel auf die zu untersuchende Probe fokussiert. Der Strahlteiler und der Referenzarm aus dem konventionellen OCT-Aufbau (siehe Abb. 3.1) sind nicht vorhanden. Stattdessen wird ein sog. Common-Path-OCT [1, 101] realisiert, in dem die Oberfläche der Probe als Referenz genutzt wird. Die Reflexe aus verschiedenen Ebenen der Probe interferieren am Detektor. Die Interferenzmodulationen tragen die Strukturinformation. TD-OCT ist aufgrund des Fehlens des Referenzspiegels nicht möglich. Stattdessen kann SD-OCT mit einem Spektrometer oder SS-OCT mit einer durchstimmbaren XUV-Quelle durchgeführt werden. Laterale Auflösung wird durch einen Rasterscan erzeugt (Probe wird bewegt).

wird mit Hilfe einer XUV-Optik auf die zu untersuchende Probe fokussiert. Für die Fokussierung kommen dafür toroidale Spiegel unter streifendem Einfall und damit nur geringer NA zum Einsatz. Aufgrund der Unabhängigkeit von der NA bleibt die axiale Auflösung jedoch erhalten. Da kein Strahlteiler zum Einsatz kommt, wird die einfallende und ausfallende Strahlung getrennt, indem die Probe unter einem Winkel beleuchtet wird. Die von der Probe zurückgestreute bzw. reflektierte Strahlung wird detektiert. Bei einer polychromatischen Strahlungsquelle, wie beispielsweise hohe Harmonischen, kommt

hierfür ein XUV-Spektrometer mit einem dispersiven Element (Transmissions- oder Reflexionsgitter) und einer XUV-CCD-Kamera zum Einsatz und ermöglicht so Spectral-Domain XCT. Für durchstimbare monochromatische Quellen wie Undulatoren am Synchrotron kann Swept-Source XCT durchgeführt werden. In diesem Fall reicht auch eine XUV-Photodiode als Detektor aus. Laterale Auflösung wird durch ein zweidimensionales Abrastern der Probe bei festem XUV-Fokus generiert (Probe wird bewegt).

4.2 XCT-Modell

Durch die speziellen optischen Eigenschaften von Materialien, insbesondere hinsichtlich der Absorption und dem nicht senkrechten Einfall der Strahlung auf die Probe, ist es zum Verständnis von XCT und der korrekten Rekonstruktion der Strukturen notwendig, das OCT-Modell aus 3.4 entsprechend zu erweitern. Dazu muss zunächst die Wechselwirkung zwischen einfallender Strahlung und Probe modelliert werden, um die axialen Strukturen exakt rekonstruieren zu können. Betrachtet man die Probe als räumlich inhomogene dreidimensionale isotrope Brechzahlverteilung (bzw. dielektrische Funktion $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$), wird die Wechselwirkung durch die inhomogene Helmholtz-Gleichung (Gl. 3.6) vollständig beschrieben¹⁹. Im allgemeinen Fall kann die Gleichung nicht analytisch gelöst werden. Für langsam veränderliche dreidimensionale Brechzahlverteilungen (Änderung langsamer als die Wellenlänge des Lichtes) existieren analytische Näherungslösungen, welche die Grundlage für 3D-Streutheorien bilden (z.B. die auch in der Quantenmechanik weit verbreitete erste Born'sche Näherung) [72, S.699ff]. Diese Arbeit konzentriert sich aber, wie bereits beschrieben, auf XCT mit kleiner NA. Da bei kleiner NA die axiale Auflösung von XCT wesentlich höher ist als die laterale, sind die charakteristischen lateralen Strukturen der untersuchten Proben wesentlich größer als die axialen. Eine dreidimensionale Streutheorie ist deshalb nicht notwendig, um XCT mit kleiner NA zu modellieren. Stattdessen wird die Probe innerhalb der Fokussfläche als lateral nicht veränderliches Schichtsystem angenommen und die Bestrahlung entspricht näherungsweise einer ebenen Welle. Die Helmholtz-Gleichung kann dann durch die Matrixmethode (siehe Abschnitt 3.1.3) für beliebige axiale Brechzahlverteilungen (insbesondere auch nicht stetiger Brechzahlsprünge) und beliebige Einfallswinkel exakt gelöst werden.

Für eine einzelne Schicht mit der komplexen Brechzahl n_f , eingehüllt in Cladding n_c und Substrat n_s , ergibt sich die Feld-Reflektivität für TE-Polarisation bei Einfall aus dem

¹⁹Dies gilt natürlich nur, solange die optischen Eigenschaften der beteiligten Strukturen noch durch eine isotrope Brechzahl beschrieben werden können. Sind die charakteristischen Strukturgrößen jedoch im Bereich nur weniger Atomgrößen, müssen anisotropische Effekte, die letztlich durch die Anordnung der einzelnen Atome entstehen, beachtet werden (z.B. Röntgenbeugung am Atomgitter). Da im XUV die Wellenlängen noch einigen 10 bis 100 Atomlagen entsprechen und die charakteristischen Strukturgrößen, die mit XCT untersucht werden, in diesem Bereich liegen, wird in der gesamten Arbeit vollständige Isotropie aller Proben angenommen.

Cladding auf die Schicht zu

$$r^{\text{TE}} = \frac{(k_{\text{cz}} - k_{\text{sz}}) \cos(k_{\text{fz}} z) + i(k_{\text{fz}} - \frac{k_{\text{sz}} k_{\text{cz}}}{k_{\text{fz}}}) \sin(k_{\text{fz}} z)}{(k_{\text{cz}} + k_{\text{sz}}) \cos(k_{\text{fz}} z) - i(k_{\text{fz}} + \frac{k_{\text{sz}} k_{\text{cz}}}{k_{\text{fz}}}) \sin(k_{\text{fz}} z)} = A \frac{B \cot(k_{\text{fz}} z) + i}{C \cot(k_{\text{fz}} z) - i}. \quad (4.1)$$

Dabei gilt

$$A = \frac{k_{\text{fz}} - \frac{k_{\text{sz}} k_{\text{cz}}}{k_{\text{fz}}}}{k_{\text{fz}} + \frac{k_{\text{sz}} k_{\text{cz}}}{k_{\text{fz}}}} \quad B = \frac{k_{\text{cz}} - k_{\text{sz}}}{k_{\text{fz}} - \frac{k_{\text{sz}} k_{\text{cz}}}{k_{\text{fz}}}} \quad C = \frac{k_{\text{cz}} + k_{\text{sz}}}{k_{\text{fz}} + \frac{k_{\text{sz}} k_{\text{cz}}}{k_{\text{fz}}}}. \quad (4.2)$$

Alle Größen mit Ausnahme von z können dabei komplexe Größen sein. Durch mehrfaches Anwenden der geometrischen Reihenentwicklung kann man Gl. 4.1 auch als Summe über Phasenterme schreiben. Es gilt

$$r^{\text{TE}} = A \left[-1 - \sum_{m=1}^{\infty} (i \cot(k_{\text{fz}} z))^m (-1)^m C^m \left(1 + \frac{B}{C} \right) \right]. \quad (4.3)$$

Mit der Entwicklung des Kotangens

$$\cot(k_{\text{fz}} z) = -i - 2i \sum_{p=1}^{\infty} e^{i2pk_{\text{fz}} z} \quad (4.4)$$

ergibt sich damit

$$r^{\text{TE}} = A \left[-1 - \sum_{m=1}^{\infty} \left(-C - 2C \sum_{p=1}^{\infty} e^{i2pk_{\text{fz}} z} \right)^m \left(1 + \frac{B}{C} \right) \right]. \quad (4.5)$$

Die Doppelsumme kann unter den Konvergenz-Bedingungen

$$|k_{\text{fz}} z| < 1 \quad \text{und} \quad \left| C \frac{e^{i2k_{\text{fz}} z} + 1}{e^{i2k_{\text{fz}} z} - 1} \right| < 1, \quad (4.6)$$

die durch die hohe Absorption ($1/k_{\text{fz}}'' < 10\mu\text{m}$) im XUV meist erfüllt sind, vereinfacht werden:

$$r^{\text{TE}} = A \left[-1 + \frac{C (e^{i2k_{\text{fz}} z} + 1)}{C (e^{i2k_{\text{fz}} z} + 1) - (e^{i2k_{\text{fz}} z} - 1)} \left(1 + \frac{B}{C} \right) \right]. \quad (4.7)$$

Dieses Ergebnis kann nun wieder in eine Reihe entwickelt werden:

$$r^{\text{TE}} = A \frac{B-1}{C+1} + 2A \frac{C+B}{(C+1)^2} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1-C}{1+C} \right)^{m-1} e^{i2mk_{\text{fz}} z}. \quad (4.8)$$

Mit den Ersetzungen 4.2 ergibt sich schließlich die Reihenentwicklung von r^{TE} zu

$$r^{\text{TE}} = \frac{k_{\text{cz}} - k_{\text{fz}}}{k_{\text{cz}} + k_{\text{fz}}} + \frac{4k_{\text{fz}}k_{\text{cz}}(k_{\text{fz}} - k_{\text{sz}})}{(k_{\text{cz}} + k_{\text{fz}})^2(k_{\text{fz}} + k_{\text{sz}})} \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{(k_{\text{fz}} - k_{\text{sz}})(k_{\text{fz}} - k_{\text{cz}})}{(k_{\text{fz}} + k_{\text{sz}})(k_{\text{fz}} + k_{\text{cz}})} \right]^{m-1} e^{2imk_{\text{fz}}z}. \quad (4.9)$$

Dieser Ausdruck kann mit den Feld-Reflektivitäten und -Transmissivitäten der isolierten Grenzflächen noch weiter vereinfacht werden. Die Feld-Reflektivität an einer isolierten Grenzfläche zwischen einer Schicht j und Schicht l wird im folgenden r_{jl} bei Einfall aus Richtung von j bzw. r_{lj} bei Einfall aus Richtung von l genannt. Gleiches gilt für die Transmissivitäten der Schichten θ_{jl} bzw. θ_{lj} . Mit Gleichung 4.1 ergibt sich dann

$$r_{jl}^{\text{TE}} = -r_{lj}^{\text{TE}} = \frac{k_{jz} - k_{lz}}{k_{jz} + k_{lz}} \quad (4.10)$$

$$\theta_{jl}^{\text{TE}} = \frac{2k_{jz}}{k_{jz} + k_{lz}} = 1 + r_{jl}^{\text{TE}} \quad (4.11)$$

$$\theta_{lj}^{\text{TE}} = \frac{2k_{lz}}{k_{lz} + k_{jz}} = 1 + r_{lj}^{\text{TE}} = 1 - r_{jl}^{\text{TE}}. \quad (4.12)$$

Für TM-Polarisation kann eine analoge Betrachtung erfolgen, deren Ausdrücke für die Reflektivitäten und Transmittivitäten leicht unterschiedlich sind. In beiden Fällen ergibt sich für die Feld-Reflektivität des betrachteten Schichtsystems²⁰:

$$\begin{aligned} r &= r_{\text{cf}} + \theta_{\text{cf}}\theta_{\text{fc}}r_{\text{fs}} \sum_{m=1}^{\infty} (r_{\text{fc}}r_{\text{fs}})^{m-1} e^{2imk_{\text{fz}}z} \\ &= r_{\text{cf}} + (1 - r_{\text{cf}}^2)r_{\text{fs}} \sum_{m=1}^{\infty} (-r_{\text{cf}}r_{\text{fs}})^{m-1} e^{2imk_{\text{fz}}z}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Dieser Ausdruck lässt sich nun anschaulich interpretieren. Die Gesamtreflektivität ist die Summe aus der Reflektivität der Oberfläche und sämtlicher Mehrfachreflexionen in der Schicht f . Da das Licht durch die Oberfläche eindringen als auch wieder ausdringen muss, werden sämtliche Summanden mit den Transmissivitäten gewichtet. Im XUV sind die Reflektivitäten an Grenzschichten eher klein. Außerdem ist die Absorption k''_{fz} groß. Beides führt dazu, dass die Amplituden der Mehrfachreflexionen sehr schnell gegen Null gehen. In guter Näherung kann die Gesamtreflektivität deshalb aus dem Oberflächenreflex und dem Reflex an der zweiten Grenzfläche beschrieben werden:

$$r \approx r_{\text{cf}} + \theta_{\text{cf}}\theta_{\text{fc}}r_{\text{fs}}e^{-2k''_{\text{fz}}z}e^{2ik'_{\text{fz}}z} = r_1 + r_2e^{2ik'_{\text{fz}}z}. \quad (4.14)$$

²⁰ Je nach Eingangspolarisation müssen die entsprechenden Ausdrücke für die isolierten Reflektivitäten bzw. Transmissivitäten verwendet werden. Bei gemischter (Linearkombination von TE- und TM-Moden) Eingangspolarisation müssen die reflektierten Felder mit den entsprechenden Feld-Reflektivitäten komponentenweise berechnet werden.

Alle Größen bis auf z hängen von ω ab und können komplex sein.

Für ein Schichtsystem aus beliebig vielen Schichten N mit den Dicken $d_j = z_{j+1} - z_j$ und den z -Komponenten der k -Vektoren k_{jz} und der Annahme, dass keine Mehrfachreflexionen auftreten, setzt sich die Summe 4.14 einfach fort und für die Gesamtreflektivität des Schichtsystems ergibt sich:

$$r \approx r_1 + \sum_{j=2}^{N+1} \left[r_j \prod_{l=1}^{j-1} e^{2ik'_{lz}(z_{l+1}-z_l)} \right]. \quad (4.15)$$

Dabei ist zu beachten, dass für die Reflektivitäten bzw. Transmissivitäten der isolierten Grenzflächen r_{jl} bzw. θ_{jl} sowie der effektiven Reflektivitäten r_j folgende Konventionen gelten:

$$r_1 = r_{c1} \quad (4.16)$$

$$r_{j>1} = r_{(j-1)j} \prod_{l=1}^{j-1} \theta_{(l-1)l} \theta_{l(l-1)} e^{-2k'_{lz}(z_{l+1}-z_l)} \quad (4.17)$$

$$r_{N(N+1)} = r_{Ns}; \quad \theta_{01} = \theta_{c1}; \quad \theta_{10} = \theta_{1c}. \quad (4.18)$$

Gleichung 4.15 stellt die Reflektivität des Schichtsystems als Summe von effektiven Reflektivitäten r_j gewichtet mit den entsprechenden Phasentermen in Abhängigkeit der Schichttiefen dar. Mit Hilfe der obigen Umformungen ist es also für absorbierende Proben unter beliebigen Einfallswinkeln gelungen ein XCT-Modell herzuleiten, welches in seiner algebraischen Form beinahe dem bereits aus Kapitel 3.4 bekannten absorptionsfreien und unter senkrechten Winkeln gültigen OCT-Modell entspricht. Damit die Analogie vollständig wird, muss nun noch zusätzlich angenommen werden, dass sich die Realteile der z -Komponente der k -Vektoren in den Schichten nur wenig voneinander unterscheiden, oder dass ein Material im Schichtsystem dominant vorkommt (die Schichtdicken dieses Materials sind wesentlich größer als die der restlichen Schichten). In beiden Fällen lässt sich das Produkt in Gl. 4.15 der einzelnen Phasenterme auflösen und durch einen Phasenterm mit dem k_z -Vektor k'_{Dz} im dominanten Material und den Abständen der Schichten zur Oberfläche annähern. Mit

$$\kappa_D = 2k'_{Dz} \quad (4.19)$$

gilt dann

$$r \approx \sum_{j=1}^{N+1} r_j e^{2ik'_{Dz}(z_j-z_1)} = \sum_{j=1}^{N+1} r_j e^{i\kappa_D(z_j-z_1)}. \quad (4.20)$$

Gleichung 4.20 bildet die Grundlage für die Rekonstruktion der Tiefenstruktur bei XCT.

Zusammen mit den Ausdrücken für die isolierten Reflektivitäten r_j ist im XCT-Modell die gesamte Information über Absorption und Dispersion der Probe enthalten. Darin unterscheidet sich das hier gezeigte Modell von bereits publizierten Versionen [1, 7], in denen die Absorption nur qualitativ behandelt wurde. Mit dem Modell wird es in Zukunft möglich, neben der axialen Struktur, auch Materialeigenschaften aus einer XCT-Messung zu extrahieren (siehe Kap. 8.4). Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass der schichttiefenabhängige Phasenterm vom Realteil der z-Komponente des k-Vektors im dominanten Material k'_{Dz} abhängt. Da die Brechzahl komplex ist und das Licht unter schrägem Einfall in das Schichtsystem gebrochen wird, ist der Ausdruck für k'_{Dz} im Allgemeinen jedoch kompliziert. Die analytischen Ausdrücke für die Berechnung des Realteils von k_{Dz} sind im Anhang A.3 angegeben.

4.3 Rekonstruktion der axialen Struktur bei XCT

Die Rekonstruktion der axialen Struktur beim XCT-Verfahren basiert auf dem Konzept der in Kapitel 3.4.1 beschriebenen FD-OCT. Die eigentliche Messgröße bei XCT ist das von der Probe reflektierte Spektrum. Es ergibt sich direkt aus dem XCT-Modell (siehe Kapitel 4.2), indem das Betragsquadrat der komplexen frequenzabhängigen Feld-Reflektivität ($R = |r|^2$)²¹ berechnet wird:

$$\begin{aligned}
 S_A(\omega) &= S_0(\omega) \cdot R(\omega) \\
 &= S_0(\omega) \left\{ \underbrace{\sum_{j=1}^{N+1} |r_j(\omega)|^2}_{\text{konstante Terme}} + \underbrace{\sum_{j \neq l=1}^{N+1} |r_j(\omega)| |r_l(\omega)| \cos [\kappa_D(\omega)(z_j - z_l) + \arg(r_j(\omega)) - \arg(r_l(\omega))]}_{\text{Autokorrelationsterme}} \right\}.
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

²¹Dieser Zusammenhang ist hier nur vereinfacht dargestellt. Bei der Berechnung der spektralen Reflektivität $R(\omega)$ muss eigentlich die Eingangspolarisation beachtet werden, da das Feld im XCT-Modell in seine TE- und TM-Komponente zerlegt wurde und die Feld-Reflektivität für beide Komponenten r^{TE} und r^{TM} unabhängig berechnet werden muss. Das reflektierte Feld ergibt sich dann entsprechend der Linearkombination der reflektierten Felder $E^{\text{TE}}(\omega)$ und $E^{\text{TM}}(\omega)$. Durch die unterschiedlichen Feld-Reflektivitäten für TE- und TM-Mode ist das reflektierte Feld im Allgemeinen elliptisch polarisiert. Damit der angegebene einfache von der Eingangspolarisation unabhängige Zusammenhang $R = |r|^2$ mit entweder $r = r^{\text{TE}}$ oder $r = r^{\text{TM}}$ gültig ist, wurde in allen in dieser Arbeit vorgestellten Experimenten darauf geachtet, nur reine TE- oder TM-Polarisation zu verwenden. In diesem Fall bleibt die Polarisation nach der Reflexion erhalten und der angegebene Zusammenhang gilt uneingeschränkt.

Genau wie bei der OCT ist das reflektierte Spektrum moduliert und trägt somit Informationen über die axiale Struktur der Probe. Beim direkten Vergleich mit dem OCT-Modell (siehe Gl. 3.72) fällt jedoch auf, dass die Kreuzkorrelationsterme aufgrund des Fehlens des Referenzarmes bei XCT nicht existieren. Des Weiteren trägt der Phasenfaktor bei XCT κ_D (siehe Gl. 4.19) nun die Information über die Einfallsgometrie sowie die Brechzahl des dominanten Materials. Die Reflektivitäten sind nun komplex, was zu zusätzlichen Phasentermen führt.

Um die axiale Struktur der Probe aus dem reflektierten Spektrum zu extrahieren, kann analog zur FD-OCT eine Fourier-Transformation durchgeführt werden. Dabei ist es aufgrund der Dispersion wiederum besser, die Transformation in κ_D und ζ statt in ω und t durchzuführen. Für die analytische Darstellung wird die Umkehrfunktion der geometrischen Dispersionsrelation (Gl. 4.19) $\omega(\kappa_D)$ benötigt. Für die Fourier-Transformation des Spektrums ergibt sich dann:

$$\begin{aligned}
 \Psi_A(\zeta) &= \frac{2}{\varepsilon_0 c} \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [S_A(\omega(\kappa_D))] = \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_A(\omega(\kappa_D)) e^{i\kappa_D \zeta} d\kappa_D \\
 &= \underbrace{\frac{1}{2\pi} \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} \left[\sum_{j=1}^{N+1} |r_j(\omega(\kappa_D))|^2 \right]}_{\text{„konstante“ Terme}} * \Psi(\zeta) \\
 &\quad + \underbrace{\frac{1}{8\pi^2} \sum_{j \neq l=1}^{N+1} \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r_j(\omega(\kappa_D))] * \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r_l^*(\omega(\kappa_D))] * \Psi[\zeta - (z_j - z_l)]}_{\text{Autokorrelationsterme}} \\
 &\quad + \underbrace{\frac{1}{8\pi^2} \sum_{j \neq l=1}^{N+1} \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r_j^*(\omega(\kappa_D))] * \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r_l(\omega(\kappa_D))] * \Psi[\zeta + (z_j - z_l)]}_{\text{Autokorrelationsterme}}. \quad (4.22)
 \end{aligned}$$

Dabei gilt wieder, dass $\Psi(\zeta)$ die Fourier-Transformation des einfallenden Spektrums $S_0(\kappa_D)$ ist. Das Signal $\Psi_A(\zeta)$ (Gl. 4.22) enthält bereits die axiale Probenstruktur, da Kopien von $\Psi(\zeta)$ bei allen Differenzen zweier Schichten auftauchen. Die Breite von $|\Psi(\zeta)|$ und die Faltungen mit den energieabhängigen Reflektivitäten legen die axiale Auflösung fest. Die höchstmögliche Auflösung würde erreicht, wenn das einfallende Spektrum rechteckförmig wäre.

4.3.1 Referenzmessung und Entfaltung vom Quellspektrum

Spektren realer Lichtquellen insbesondere im XUV haben meist komplizierte Verläufe. Dementsprechend ist der Verlauf der Funktion $|\Psi|$ als Fourier-Transformation des Quellspektrums ebenfalls kompliziert und die Interpretation des Signals würde erschwert bzw. die Auflösung signifikant verschlechtert. Um dieses Problem zu vermeiden, kann

das Quellspektrum durch eine Referenzmessung (einem zusätzlichen A-Scan) auf einer bekannten Probe separat ermittelt werden und der Einfluss von Ψ entsprechend aus dem Signal $\Psi_A(\zeta)$ entfaltet werden. Am einfachsten wird dies umgesetzt, indem das von der Probe gemessene Spektrum durch das einfallende Spektrum geteilt wird:

$$R(\omega(\kappa_D)) = \frac{S_A(\omega(\kappa_D))}{S_0(\omega(\kappa_D))}. \quad (4.23)$$

So erhält man die reine Intensitätsreflektivität der zu untersuchenden Probe im durch die Breite des Quellspektrums zugänglichen Spektralbereich. Im Folgenden wird als Argument nur noch κ_D geschrieben. Gemeint ist aber weiterhin das in ω gemessene und dann mit $\omega(\kappa_D)$ nach κ_D transformierte Spektrum bzw. die Reflektivität. In Folge der Division durch das Quellspektrum wird jedoch das Rauschen in Bereichen kleiner spektraler Intensität im Quellspektrum (typischerweise an den Rändern) erhöht. Zudem entstehen bei der Fourier-Transformation einer abrupt abfallenden Funktion Fourier-Artefakte bzw. Überschwinger, die wiederum die Interpretation des Signals erschweren. Deshalb wird die ermittelte Reflektivität noch mit einer auf die jeweilige Messung angepassten Fensterfunktion $W(\kappa_D)$ gewichtet:

$$R_W(\kappa_D) = R(\kappa_D) \cdot W(\kappa_D). \quad (4.24)$$

Im Folgenden wird die Kaiser-Bessel-Funktion als Fensterfunktion verwendet, da sie einen guten Kompromiss zwischen Auflösung und Unterdrückung der Überschwinger bietet:

$$W(\kappa_D) = \begin{cases} \frac{\mathfrak{I}_0 \left[\beta \sqrt{1 - \left(\frac{2(\kappa_D - \gamma)}{\eta} \right)^2} \right]}{\mathfrak{I}_0(\beta)} & \text{für } \kappa_{D,\min} \leq \kappa_D \leq \kappa_{D,\max} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.25)$$

Dabei ist $\eta = \kappa_{D,\max} - \kappa_{D,\min}$, $\gamma = (\kappa_{D,\max} + \kappa_{D,\min})/2$ und \mathfrak{I}_0 die modifizierte Besselfunktion. Die Fensterbreite wird durch die Grenzen von κ_D vorgegeben und die Fensterform durch den Parameter β . Je größer β ist, desto besser werden Überschwinger auf Kosten der Auflösung unterdrückt. Die im Folgenden als *XCT-Signal* bezeichnete Fourier-Transformation $\mathfrak{R}_W(\zeta)$ ergibt sich dann analog zu Gleichung 4.22 zu:

$$\begin{aligned} \mathfrak{R}_W(\zeta) &= \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [R_W(\kappa_D)] = \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [R(\kappa_D) \cdot W(\kappa_D)] = \frac{1}{2\pi} \mathfrak{R}(\zeta) * \mathfrak{W}(\zeta) \\ &= \underbrace{\frac{1}{2\pi} \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} \left[\sum_{j=1}^{N+1} |r_j(\kappa_D)|^2 \right]}_{\text{„konstante“ Terme}} * \mathfrak{W}(\zeta) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \underbrace{\frac{1}{8\pi^2} \sum_{j \neq l=1}^{N+1} \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r_j(\kappa_D)] * \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r_l^*(\kappa_D)] * \mathfrak{W}[\zeta - (z_j - z_l)]}_{\text{Autokorrelationsterme}} \\
 & + \underbrace{\frac{1}{8\pi^2} \sum_{j \neq l=1}^{N+1} \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r_j^*(\kappa_D)] * \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r_l(\kappa_D)] * \mathfrak{W}[\zeta + (z_j - z_l)]}_{\text{Autokorrelationsterme}}. \quad (4.26)
 \end{aligned}$$

Die Auflösung im XCT-Signal ist durch Breite und Form der Fensterfunktion $W(\kappa_D)$ bzw. deren Fourier-Transformation $\mathfrak{W}(\zeta)$ bestimmt. Zusätzlich haben die Verläufe von $r_j(\kappa_D)$ durch die Faltungen in Gl. 4.26 einen auflösungsverringenden Effekt. Im XCT-Signal treten neben den konstanten Termen um $\zeta = 0$ nm bei allen möglichen Tiefendifferenzen zweier Schichten Kopien der Funktion $\mathfrak{W}(\zeta)$ auf. Die tatsächlichen Schichttiefen der einzelnen Schichten sind zwar immer dann enthalten, wenn eine der beteiligten Schichten die Oberfläche der Probe ist, jedoch kann diese Information im Nachhinein im Allgemeinen nicht extrahiert werden. Das Signal ist, wie bereits beschrieben, eine Autokorrelation und damit mehrdeutig.

4.3.2 XCT-Rekonstruktion an simuliertem Beispiel

Zur Veranschaulichung der XCT-Auswertung wird im Folgenden eine simulierte Reflektivität im Siliziumtransmissionsfenster von 30 eV – 99 eV benutzt. Zwei 2 nm dicke Goldschichten sind durch eine 250 nm dicke Siliziumschicht voneinander getrennt. Zusätzlich ist diese Struktur noch unter 400 nm Silizium vergraben. Das gesamte Schichtsystem (siehe Abb. 4.2a) befindet sich auf einem Siliziumsubstrat. Die spektrale Reflektivität wurde mit Hilfe der generalisierten Fresnel'schen Formeln und der Matrixmethode (siehe Kap. 3.1.3) sowie den Dispersionsdaten aus [25] berechnet. Der Einfallswinkel beträgt 75° zur Oberfläche. Die Polarisierung wurde auf TE festgelegt. Abbildung 4.2c zeigt die Reflektivität (mit und ohne Fensterfunktion), die mit Hilfe der Dispersion des dominanten Materials (Silizium) nach κ_D transformiert wurde. Das zugehörige XCT-Signal ist in Abbildung 4.2d gezeigt. Die Wirkung der Dispersionskorrektur des dominanten Materials wird deutlich, wenn für die Transformation nach κ_D statt der Brechzahl von Silizium $n_D = 1$ angenommen wird. Das entsprechende Spektrum mit dem zugehörigen XCT-Signal ist in Abbildung 4.2a bzw. b gezeigt. Beide XCT-Signale sind symmetrisch um die Tiefe 0 nm und es treten neben dem DC-Peak drei weitere Maxima auf. Aufgrund des bereits beschriebenen Autokorrelations-Charakters des Signals kann nicht entschieden werden, welche der zwei näher an der Oberfläche liegenden auftretenden Schichttiefen real ist und welche nicht. Da die simulierte Probe vorher natürlich bekannt war, wird klar, dass der Verlauf um das Maxima (im Folgenden als „Peak“ bezeichnet) bei 250 nm eine Scheintiefe ist. Das Artefakt tritt wie erwartet exakt bei der Differenz der beiden tieferen Peaks

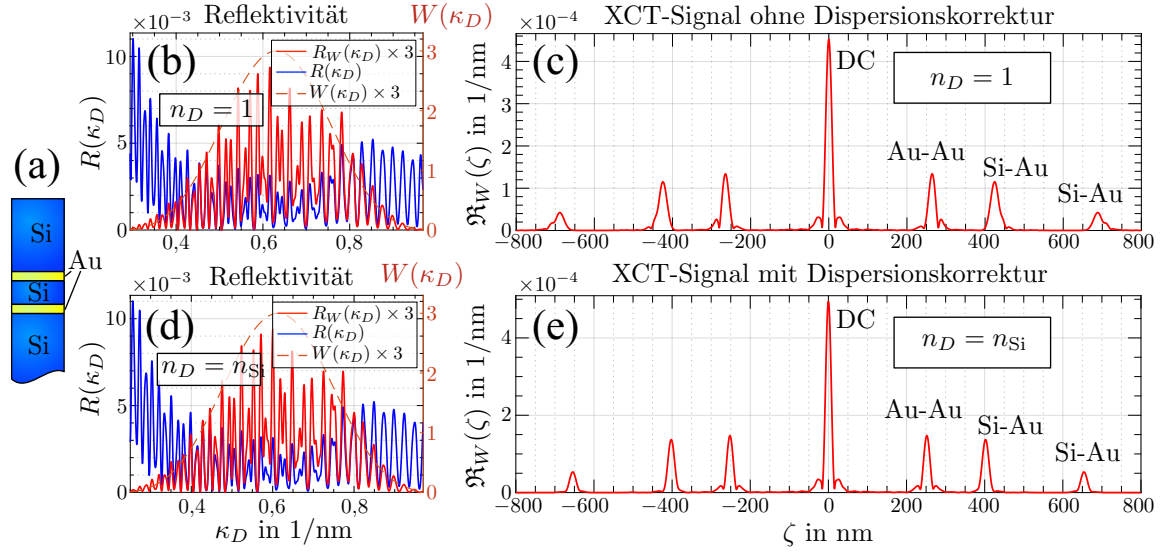


Abbildung 4.2: Simulierte Reflektivität und XCT-Signal einer Probe mit zwei vergrabenen Schichten: Die Reflektivitäten (b) und (d) (blau) einer Probe (a) mit zwei in Silizium vergrabenen dünnen Goldschichten wurden mit der Matrixmethode im Siliziumfenster (30 eV – 99 eV) simuliert. Die Photonenenergie wurde für die Darstellung bereits nach κ_D transformiert. Dabei wurde in (d) die Dispersion von Silizium verwendet ($n_D = n_{Si}$), in (b) hingegen nicht ($n_D = 1$). Zusätzlich werden auch die mit dem Fenster $W(\kappa_D)$ gewichteten Reflektivitäten dargestellt (rot) ($\beta = 8$). (c) und (e) zeigen die zu den Reflektivitäten gehörenden XCT-Signale. In beiden Signalen sind neben dem DC-Signal drei weitere Peaks vorhanden (unter Beachtung der Symmetrie des Signals). Die beiden mit „Si-Au“ bezeichneten Maxima entsprechen der realen Struktur, wohingegen das Maximum „Au-Au“ ein Artefakt ist. Nur mit Dispersionskorrektur ($n_D = n_{Si}$) ist die Auflösung maximal und die absoluten Tiefenwerte werden korrekt rekonstruiert.

auf. Beim Vergleich der Signale mit und ohne Dispersionskorrektur fällt auf, dass die Nichtbeachtung des konstanten Anteils der (energieabhängigen) Brechzahl die Tiefenachse verschiebt. Die absoluten Tiefenwerte entsprechen nicht mehr den tatsächlichen Schichttiefen. Höhere Dispersionsordnungen verschieben die Modulationsfrequenzen im Spektrum energieabhängig und verschlechtern somit die Auflösung. Dies wird an der Struktur der Peaks im nichtkorrigierten Signal auch deutlich. Durch die Dispersion entstehen Nebenmaxima (die wiederum nicht als solche erkennbar sind und auch reale Schichten sein könnten) und die Peaks werden verbreitert. Das Signal mit der Korrektur zeigt dagegen diese Effekte nicht bzw. nur sehr schwach. Dies ist auf die nicht in die Korrektur eingeflossenen Effekte der energieabhängigen Reflektivitäten $r_j(\kappa_D)$ der Schichten und die Dispersion in den dünnen Goldschichten zurückzuführen.

4.4 Signalverarbeitung und Diskretisierung

Für eine übersichtliche Darstellung der Rekonstruktionsschritte sind sämtliche mathematischen Zusammenhänge innerhalb dieser Arbeit analytisch und kontinuierlich angegeben. Die tatsächliche Aufnahme und Auswertung der Daten kann aber natürlich nur diskret

umgesetzt sein. Bevor die Tiefeninformationen aus den simulierten oder den im Experiment aufgenommenen reflektierten Spektren mit der diskreten Fourier-Transformation (implementiert als „Fast-Fourier-Transform“ - FFT) rekonstruiert werden können, müssen sie auf einen äquidistanten und ausreichend großen Träger interpoliert werden. Da die im weiteren Verlauf vorgestellten Messungen immer mit spektrometerbasierter XCT aufgenommen wurden, wird im Folgenden nur dieser Fall behandelt.

Die reflektierten Spektren werden mit Hilfe eines XUV-Spektrometers detektiert. Als dispersive Elemente kommen Gitter zum Einsatz, deren Ablenkwinkel proportional zur Wellenlänge des Lichtes sind. Die Detektion geschieht mit einer XUV-CCD-Kamera, deren Pixel die Diskretisierung des Messsignals vorgeben. Indem der zugehörige Photonenenergiewert jedes Pixel des Spektrometers vorher mit einer bekannten Quelle kalibriert wird, erhält man ein nicht-äquidistantes energieabhängiges Reflektivitätssignal. Da jedem Pixel damit auch eine energetische Breite zugeordnet ist, muss das Signal noch durch diese Breiten dividiert werden, um eine spektrale Energiedichte zu erhalten (siehe Gl. 3.47). Wie bereits in Gleichung 4.23 angegeben, wird das reflektierte Spektrum der Probe noch durch das Quellspektrum, welches durch eine Referenzmessung einer zusätzlichen Probe mit bekannter Reflektivität ermittelt wird, dividiert, um die Probenreflektivität zu erhalten. Dies hat zusätzlich den Vorteil, dass weder die Quanteneffizienz der CCD-Kamera, noch die Gittereffizienz oder andere Verluste im Spektrometer bekannt sein müssen, um die tatsächliche Probenreflektivität zu erhalten, da ihr Effekt sowohl in der Messung als auch in der Referenzmessung identisch ist. Die Güte der Referenzprobe²², die Stabilität der Quelle und die Güte der Energiekalibrierung des Spektrometers bestimmen die Genauigkeit der Reflektivitätsmessung.

Nach Ermittlung der (energieabhängigen) Reflektivität wird diese auf einen mit Hilfe von Gleichung A.5, der Dispersion des dominanten Materials und dem Einfallswinkel bestimmten äquidistanten Träger in $\kappa_D = 2k'_{j=D}z$ interpoliert. Zur Unterdrückung von Fourier-Artefakten wird die Reflektivität nun mit der diskreten Version der Filterfunktion 4.25 gewichtet. Zusätzlich wird das Signal von $\kappa_D = 0$ bis $\kappa_{D\max} > \kappa_D(\omega_{\max})$ mit Nullen aufgefüllt (sog. „Zero-Padding“), um den numerischen Diskretisierungsabstand der Tiefenachse nach der Fourier-Transformation zu erhöhen. Schließlich wird eine FFT durchgeführt, um das XCT-Signal in Abhängigkeit der Tiefe zu erhalten. Die tatsächliche physikalische Auflösung sowie die maximal messbare Tiefe werden durch die Interpolation selbstverständlich nicht verändert. Sie bleiben bestimmt durch die Breite des zur Verfügung stehenden Quellspektrums in Kombination mit der Filterfunktion und der Diskretisierung der Kamerapixel des Spektrometers. Die maximal darstellbare Tiefe ζ_{\max}

²²wie genau die Reflektivität der Referenzprobe zum Zeitpunkt der Messung bekannt ist

(Frequenz im κ_D Raum) wird durch das Nyquist-Shannon Sampling-Kriterium begrenzt:

$$\zeta_{\max} = \frac{\pi}{\Delta\kappa_{D\min}}. \quad (4.27)$$

Dabei ist $\Delta\kappa_{D\min}$ der durch das Spektrometer vorgegebene minimale Diskretisierungsabstand²³. Strukturen, die tiefer liegen, werden nicht mehr dargestellt bzw. werden durch Aliasing-Effekte an falscher Stelle (bei geringeren Tiefen) abgebildet. Typischerweise ist jedoch die spektrale Auflösung des Spektrometers geringer als der durch die Pixel vorgegebene Diskretisierungsabstand, sodass die tatsächlich noch darstellbare Tiefe kleiner wird.

4.5 Synchrotronbasierte XCT

Die ersten experimentellen XCT-Messungen sind an einer Synchrotronstrahlungsquelle realisiert worden [7, 40]. Das beschriebene XCT-Konzept (siehe Abb. 4.1) wurde am Strahlrohr „BW3“ [102] des mittlerweile stillgelegten „DORISIII“-Speicherrings am Deutschen Elektronen Synchrotron (DESY) in Hamburg experimentell umgesetzt und es konnte eine axiale Auflösung von wenigen Nanometern demonstriert werden [7]. Mit Hilfe eines toroidalen Spiegels unter streifendem Einfall ($3,8^\circ$ zur Oberfläche bei einer Brennweite von $f = 36$ cm) wurde ein Tomogramm mit spektrometer-basierter XCT²⁴ von zwei getrennten Goldschichtstrukturen in Silizium aufgenommen. Die Struktur der Probe ist in Abb. 4.3a dargestellt. Das dreidimensionale XCT-Signal wurde als Schrägsicht (4.3b) visualisiert. Aus Darstellungsgründen wird zusätzlich zur Falschfarbenkodierung (siehe Farbachse) auch die Transparenz der einzelnen Voxel exponentiell mit ihrem Wert abgesenkt, sodass Gebiete mit wenig Signal transparenter erscheinen. Die gezeigte Darstellung des Signals von der Seite (4.3c) ist entsprechend kein Schnitt durch die Probe, sondern eine durch die Transparenzen gewichtete Projektion. Das hat den Vorteil, dass Informationen aus allen Schnitten in Projektionsrichtung sichtbar bleiben. Die dreidimensionale Struktur der Probe (abgesehen vom Artefakt) konnte mit einer axialen Auflösung von ≈ 17 nm rekonstruiert werden, was einer Verbesserung um zwei Größenordnungen im Vergleich zur OCT entspricht. Die laterale Auflösung der XCT-Messung war durch die schlechte Fokussierbarkeit der Synchrotronstrahlung begrenzt auf ca. $200 \times 300 \mu\text{m}$. Die Probe

²³Die eigentliche Spektrometerdiskretisierung ist weder äquidistant in κ_D noch in der Energie. Selbst auf der Wellenlängenskala ist, durch den flachen Detektor, eine äquidistante Diskretisierung nicht gegeben. Der Diskretisierungsabstand ist für kleine κ_D kleiner als für große κ_D . Deshalb verändert sich die maximal abtastbare Tiefe mit der Wellenzahl. Im XCT-Signal führt dies dazu, dass das Signal bei maximaler Tiefe nicht abrupt abbricht, sondern sich die Auflösung bei Annäherung an ζ_{\max} immer weiter verschlechtert, da das zur Verfügung stehende spektrale Fenster, welches die entsprechende Frequenz noch abbilden kann, aus Richtung hoher κ_D -Werte beschnitten wird.

²⁴Der Monochromator des Synchrotrons wurde nicht genutzt. Stattdessen wurde die breitbandige „Bending-Magnet“ Strahlung des Umlenkmagneten direkt als Strahlungsquelle verwendet.

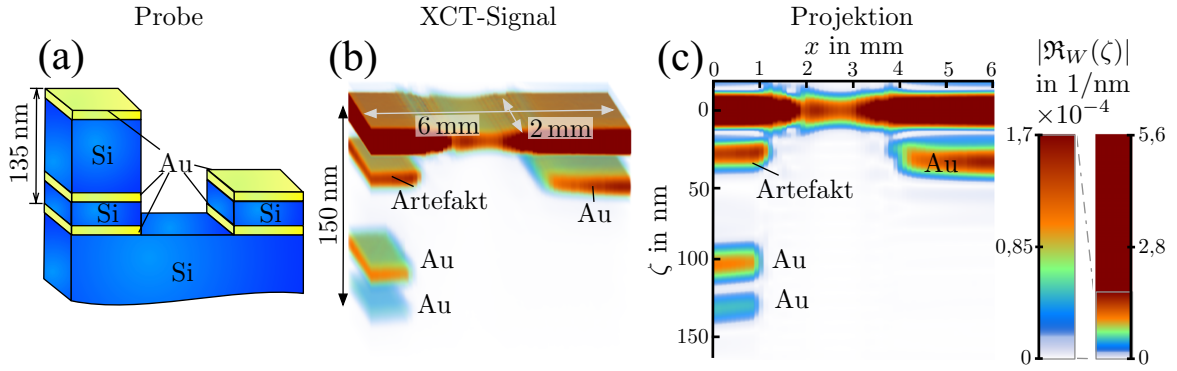


Abbildung 4.3: Dreidimensionale XCT-Messung am Synchrotron: Die in (a) schematisch dargestellte Probe wurde im Photonenenergiebereich von 35 eV – 98 eV an einer Synchrotronquelle mit XCT untersucht (TM-Polarisation) [7, 40]. (b) zeigt eine mit Transparenzen gewichtete Falschfarbendarstellung des Tomogramms in Schrägsicht, während (c) eine mit derselben Farb- und Transparenzkodierung gewichtete Projektion zeigt. Das laterale Scanraster beträgt $100 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$. Die tatsächliche laterale Auflösung beträgt aufgrund des ausgedehnten Fokus etwa $300 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$. Für das Tomogramm wurden $61 \times 21 = 1281$ laterale Punkte (A-Scans) in insgesamt 135 Minuten (6,3 s pro A-Scan, davon 1 s Belichtungszeit) aufgenommen. Für die Rekonstruktion wurde ein Kaiser-Bessel-Fenster mit $\beta = 4$ eingesetzt und so eine axiale Auflösung von 17 nm erreicht. Die dreidimensionale Struktur der Probe konnte rekonstruiert werden. Da die Oberfläche der Probe als Referenz dient, kann nur relativ zu dieser gemessen werden. Ein Autokorrelations-Artefakt ist in der Messung deutlich zu erkennen.

wurde mit einer lateralen Schrittgröße von $100 \mu\text{m}$ an 1281 Punkten abgerastert. Die Messdauer für das Tomogramm betrug 2 h 15 min und setzt sich aus der Belichtungszeit pro Punkt von 1 s und den Zeiten für das Auslesen der Kamera sowie das Weiterfahren der Probe zusammen. Da kein ausgezeichneter Referenzarm vorhanden ist, kann die tatsächliche Topographie der Oberfläche nicht abgebildet werden. Die Tiefenstruktur kann nur relativ zur zugehörigen Oberfläche bestimmt werden, was in der Abbildung auch deutlich wird. Wie bereits mehrfach beschrieben, hat das vom technischen Aufwand her sehr attraktive XCT-Konzept ohne Referenzarm den Nachteil der Mehrdeutigkeit. Für die gezeigte Messung wurde deshalb ein einfacher Ansatz gewählt, der zwar die Artefakte nicht beseitigt, sie jedoch im Vergleich zu den realen Tiefensignalen abschwächen sollte. Dazu wurde auf die zu untersuchenden Proben eine dünne hochreflektierende Deckschicht (z. B. 5 nm Gold) aufgebracht (Abb. 4.3a). Dadurch werden die Amplituden (R_1 bzw. r_1) derjenigen Interferenzen erhöht, an denen die Oberfläche beteiligt ist und diese somit den realen Strukturen entsprechen. Die Amplituden der Scheintiefen bleiben dagegen weitgehend unverändert. Aufgrund von Diffusionseffekten und dem inselartigen Wachstum von dünnen Goldschichten war die hochreflektierende Deckschicht auf den Proben aber nicht geschlossen, was erst nach der Messung bekannt wurde. Dies führte dazu, dass der Unterdrückungseffekt schwächer ausfiel als geplant und dass die Artefakte deutlich sichtbarer sind. Dennoch wurde durch das Experiment erstmals demonstriert, dass XCT durchführbar ist und die erwartete hohe axiale Auflösung erreicht.

5 Lasergetriebene XUV Kohärenztomographie

Die Unabhängigkeit von Synchrotrons ist eine der entscheidenden Voraussetzungen für die breite Einsetzbarkeit des XCT-Verfahrens und war deshalb ein Ziel dieser Arbeit. Damit XCT im Labormaßstab umgesetzt werden konnte, mussten zunächst geeignete Konzepte der laserbasierten XUV-Erzeugung evaluiert, die entsprechende Quelle konzipiert, aufgebaut und getestet werden, um sie schließlich für XCT einzusetzen.

5.1 Lasergetriebene XUV-Strahlungsquelle für XCT

Es wurden mit Laserplasmen und der Erzeugung hoher Harmonischer von Oberflächen und in Gasen drei Methoden der laserbasierten XUV-Erzeugung hinsichtlich ihrer Tauglichkeit für XCT evaluiert. Die Konversionseffizienz der laserbasierten Erzeugungs-Methoden fällt im Allgemeinen mit steigender XUV-Photonenenergie ab [22]. Deshalb konzentriert sich diese Arbeit auf laserbasierte XUV-Quellen im Siliziumtransmissionsfenster (30 eV – 100 eV), da nur dort mit den zur Verfügung stehenden Lasern ausreichend Fluss erzeugt werden kann²⁵.

5.1.1 Laserinduzierte Plasmen

Laserinduzierte Plasmen können im XUV-Bereich abstrahlen [29, 30, 103]. Die Konversionseffizienz von Laserstrahlung zu XUV ist zwar von allen in Frage kommenden Quellen am höchsten, jedoch wird die Strahlung in den gesamten Raumwinkel abgestrahlt. Eine Kollimationsoptik mit entsprechend großem Öffnungswinkel ist daher notwendig, um die Strahlung effizient zu nutzen. Entsprechende Optiken mit hoher NA sind jedoch sehr aufwendig und erfüllen die Anforderungen hinsichtlich der Breitbandigkeit nicht (siehe auch Kapitel 4). Zusätzlich ist die Quellgröße durch das ausgedehnte Plasma vorgegeben und führt zu einer schlechten räumlichen Kohärenz der Quelle. Entsprechend ist eine für die laterale Auflösung notwendige Fokussierung auf kleinen Skalen (Mikrometer) nicht bzw. nur mit aufwendigen Optiken und weiterer räumlicher Filterung und damit Einbußen hinsichtlich des Photonenflusses realisierbar. Je nach Art des Mediums, in welchem das Plasma gezündet wird, besteht die Strahlung typischerweise aus Linienstrahlung der im Plasma vorhandenen Elemente. Der überwiegende Teil der Strahlung ist somit dominiert durch spektral schmale Emissionslinien. Für die Kohärenztomographie wird jedoch ein breites, möglichst glattes Spektrum benötigt. Des Weiteren entsteht je nach eingesetztem Medium ein hohes Maß an Verschmutzung im Vakuum, welches die Optiken langfristig

²⁵In Zukunft sollen aber auch laborbasierte Wasserfensterquellen entwickelt und eingesetzt werden (siehe Kap. 8.5).

beschädigt und die Wartung entsprechend aufwendig und teuer macht. Aufgrund der Nachteile wurde diese Quelltechnologie zumindest für den Einsatz im Siliziumtransmissionsfenster verworfen.

5.1.2 Erzeugung hoher Harmonischer

Hohe Harmonische zeichnen sich dadurch aus, dass die Eigenschaften des treibenden Lasers im Allgemeinen erhalten bleiben. Insbesondere die gute räumliche Kohärenz der Quellen ermöglicht eine beugungsbegrenzte Fokussierung. Dabei wird die Strahlung nur in einem kleinen Raumwinkel emittiert und kann daher auch mit in der NA begrenzten Optiken vollständig genutzt werden. Hohe Harmonische können im Allgemeinen nicht isoliert erzeugt werden²⁶. Die Strahlung ist demnach intrinsisch breitbandig und besitzt damit die für OCT notwendige kurze Kohärenzlänge.

Es wurden zwei Arten der Harmonischen-Erzeugung für XCT evaluiert. Die Erzeugung von relativistischen Oberflächenharmonischen von Festkörpern (SHHG) [105–107] stellte sich dabei durch die hohen erforderlichen Intensitäten von $> 10^{18} \text{ W/cm}^2$ und den hohen Material- und Justageaufwand als nicht ideal für XCT heraus. Die in Kapitel 3.5.2 erläuterte Erzeugung von hohen Harmonischen in Gasen (HHG) ist hingegen experimentell einfacher umzusetzen und benötigt nur Intensitäten von $> 10^{13} \text{ W/cm}^2$. Diese Quellen sind zudem sehr gut verstanden und werden bereits in vielen Bereichen, hauptsächlich aber in der Attosekundenphysik, eingesetzt [11]. Für einen Einsatz in der Bildgebung waren die erreichbaren Photonenflüsse jedoch aufgrund der geringen Konversionseffizienz lange Zeit zu gering. Mit der Entwicklung von geeigneten Laserquellen mit hohen Durchschnittsleistungen wurden laborbasierte XUV-Mikroskopieaufbauten zumindest im Photonenenergiebereich bis 100 eV ermöglicht. Aufgrund der guten räumlichen Kohärenz [96, 97] werden HHG-Quellen vorrangig für linsenlose kohärente Verfahren wie CDI [9] oder Ptychographie [10] eingesetzt. Wie bereits beschrieben, muss die Strahlung dafür aber typischerweise unter hohen Verlusten an Photonenfluss monochromatisiert²⁷ werden. Für XCT ist die extrem breitbandige Strahlung jedoch eine ideale Quelle. Die gute Fokussierbarkeit der Harmonischen erlaubt je nach NA neben der durch die Bandbreite bestimmten axialen Auflösung im Nanometerbereich auch eine gute laterale Auflösung. Quellseitig betrachtet, macht die Ausnutzung des breitbandigen Photonenflusses XCT auch zu einer idealen Bildgebungsanwendung für HHG-Quellen.

²⁶Selbstverständlich kann die Strahlung monochromatisiert werden. Dies kann entweder nach dem Entstehungsprozess mit Monochromatoren geschehen oder bereits im Prozess durch Reabsorption oder das Ausnutzen von Resonanzen [104]. Durch die Monochromatisierung geht aber ein Großteil des aufwendig erzeugten Flusses für die Bildgebung verloren.

²⁷Seit kurzer Zeit werden auch polychromatische CDI-Verfahren entwickelt [70].

5.1.3 Anpassung einer HHG-Quelle für XCT

Eine charakteristische Eigenschaft von hohen Harmonischen ist, dass das Spektrum entsprechend der harmonischen Ordnungen typischerweise stark moduliert ist [85]. Je nach Abstand und Breite der Maxima ist der Photonenfluss zwischen den Harmonischen sehr gering. Durch die vorherige Messung des Quellspektrums (Referenzmessung) und der anschließenden Entfaltung im XCT-Signal können die Modulationseffekte (und damit das Auftreten von weiteren nicht mit der Tiefenstruktur verknüpften Frequenzen im XCT-Spektrum) zwar bis zu einer gewissen Ausprägung beseitigt werden. Liegt der Photonenfluss zwischen den Harmonischen aber unterhalb des Signal-Rausch-Pegels des Spektrometers, führt die Entfaltung nur zur Verstärkung des Rauschens. Die strukturelle Information in diesen spektralen Bereichen geht dann verloren und es kommt, neben einem hohen Untergrund, zu Artefakten im XCT-Signal. Bevor also die HHG-Strahlung für XCT genutzt werden konnte, musste ein Weg gefunden werden, die Quelle so zu betreiben, dass auch der Photonenfluss zwischen den Harmonischen ausreichend hoch ist. Je länger der treibende Laserpuls ist, desto ausgeprägter und schärfer wird die Kammstruktur der Harmonischen (siehe auch Kap. 3.5.2). Entsprechend führt eine Verkürzung des Laserpulses, im Idealfall auf einen Halbzyklus, zu einem glatteren Spektrum. Die Kompression der Laserstrahlung ist aber nicht ohne hohe Verluste an Energie zu bewerkstelligen. Die zum Zeitpunkt der Quellentwicklung zur Verfügung stehende, bei 800 nm Mittenwellenlänge betriebene Laserquelle mit wenigen optischen Zyklen und eine entsprechend implementierte HHG-Quelle, erreichte so nicht den notwendigen Photonenfluss für Messungen im Siliziumfenster [108]. Dies lag einerseits an der begrenzten Durchschnittsleistung des Systems (≈ 1 W) und andererseits an der zu kurzen Mittenwellenlänge, da die maximal erreichbare Photonenenergie (der Cut-Off) quadratisch mit der Mittenwellenlänge des Lasers steigt (siehe Gleichung 3.85).

Die letztendlich umgesetzte Lösung basiert auf einem optischen parametrischen Verstärker (OPA) [109] (Gerät TOPAS der Firma Light-Conversion), der die Laserwellenlänge des treibenden Ti:Sa-Systems in den nahen Infrarotbereich (1300 nm) konvertiert. Die dadurch erhöhte Cut-Off Energie im HHG-Prozess ermöglicht es, für XCT im Siliziumtransmissionsfenster benötigte Photonenenergien zu erzeugen. Die Pulsdauer des konvertierten Lichtes beträgt jedoch etwa 50 fs (ca. 12 optische Zyklen), sodass durch den HHG-Prozess eine ausgeprägte spektrale Kammstruktur entsteht. Der in Abbildung 5.1 dargestellte OPA basiert auf der Differenzfrequenzerzeugung zwischen Pumplicht und des mit Hilfe von Weißlichterzeugung (Selbstphasenmodulation) generierten sog. „Signals“ [71, S.885ff]. Durch Änderung des zeitlichen Versatzes zwischen Pumplicht²⁸ und (stark geschirptem) Weißlicht im DFG-Kristall (BBO), sowie der entsprechenden Winkeländerung zur Phasenanpassung,

²⁸Ti:Sa-Laser: 800 nm Mittenwellenlänge, 10 mJ Pulsenergie, 1 kHz Repititionsrate und 35 fs Pulsdauer

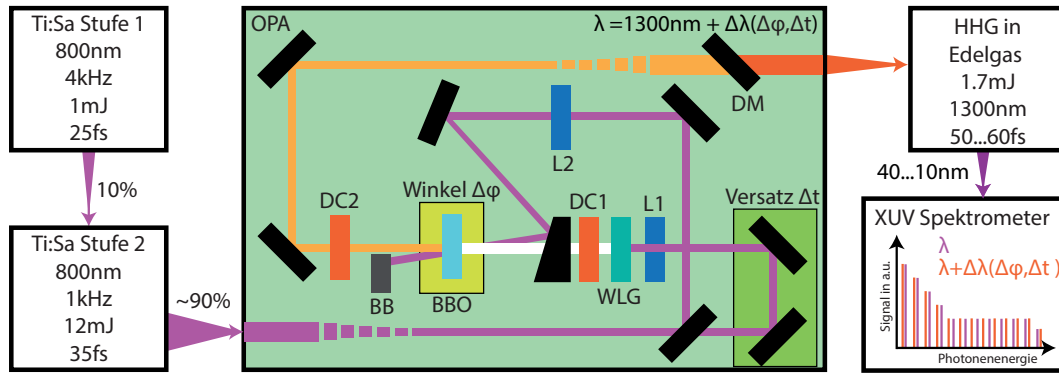


Abbildung 5.1: Darstellung der speziell für XCT angepassten Laserquelle: Ein optischer parametrischer Verstärker (OPA) (grün) wird mit einem Ti:Sa-Laser betrieben. Im OPA wird in einem Saphir (WLG) durch Selbstphasenmodulation Weißlicht erzeugt. Mit Hilfe der Linsen L1 und L2 und dispersiven Elementen DC1 und DC2 wird ein Teil des Weißlichtes mit dem zeitlich versetzten Pumpstrahl in einem nichtlinearen Kristall (BBO) überlagert. Durch Differenzfrequenzerzeugung wird Leistung aus dem Pumpstrahl zu längeren Wellenlängen („Signal“ und „Idler“) konvertiert. Die restliche Pumpstrahlung wird geblockt (BB). Im OPA kann die Wellenlänge des emittierten Lichtes (es wird hier das „Signal“ genutzt) durch das Verfahren mehrerer Motoren (Versatz und Winkel) eingestellt werden. Innerhalb einer Sekunde kann so die Wellenlänge um 100 nm verschoben werden. Das „Signal“ wird mit einem dichroitischen Spiegel (DM) vom „Idler“ getrennt und wird durch den HHG-Prozess nachfolgend in den XUV-Bereich konvertiert (siehe auch Abb. 5.3). Durch das Schieben der Wellenlänge wird es möglich, im zeitlichen Mittel ein für XCT geeignetes XUV-Superkontinuum zu erzeugen. In der Abbildung ist ein einstufiges System dargestellt. Das reale OPA-System ist jedoch dreistufig. (Abbildung übersetzt aus [5])

kann die Wellenlänge des OPA sehr schnell über einen großen Bereich geändert werden²⁹. Durch den Einsatz von schnellen Motoren kann die Wellenlänge des Signals („Idler“ wird nicht genutzt) innerhalb einer Sekunde von 1200 nm bis 1400 nm durchgestimmt werden³⁰. Da die Belichtungszeiten für die Aufnahme eines XUV-Spektrums auf einer Probe (einzelner A-Scan) bei dem zur Verfügung stehenden Fluss im Bereich einiger Sekunden liegt, kann die Mittenwellenlänge innerhalb dieser Zeitspanne komplett durchgestimmt werden. Der Abstand der dabei entstehenden Harmonischen variiert entsprechend der harmonischen Ordnung mit der Grundwellenlänge und die vormaligen „Lücken“ im HHG-Spektrum (Bereiche zwischen den Harmonischen ohne nennenswerten Photonenfluss) werden durch die zeitliche Mittelung über mehrere Treiber-Wellenlängen aufgefüllt [41]. Es entsteht im zeitlichen Mittel ein für XCT ausreichend glattes und breites XUV-Spektrum mit ausreichend großem Photonenfluss, welches als XUV-Quasisuperkontinuum bezeichnet werden kann [5, 110]. Anders ausgedrückt, basiert die lasergetriebene XCT auf einer Kombination von spektrometerbasierter XCT und Swept-Source XCT. Ein typisches Quellspektrum ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Neben dem zeitlich gemittelten Spektrum, wurden auch die Spektren der einzelnen angefahrenen Wellenlängen aufgenommen.

²⁹Das reale OPA System ist dreistufig, sodass Winkel und zeitlicher Versatz von drei BBO Kristallen eingestellt werden müssen.

³⁰Derartig schnelle und große Verschiebungen der Mittenwellenlänge lassen sich mit einem Ti:Sa-System nicht bewerkstelligen.

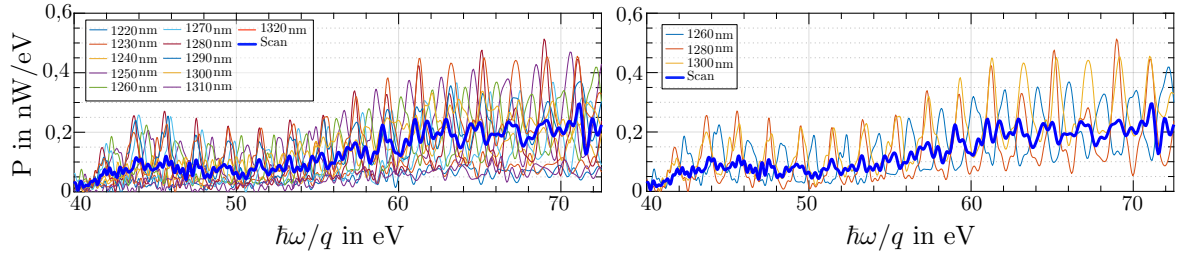


Abbildung 5.2: Typisches XUV-Spektrum der HHG-Quelle: In der linken Abbildung sind die HHG-Spektren aller einzelnen mit dem OPA-System im Bereich von 1220nm bis 1320nm angefahrenen Grundwellenlängen dargestellt. In blau (dick) ist das aus allen einzelnen Wellenlängen zusammengesetzte zeitlich gemittelte Spektrum gezeigt. Dazu wurde die Wellenlänge während einer einzelnen Belichtung der CCD automatisiert variiert. Die rechte Abbildung zeigt für die bessere Übersicht nur die Spektren dreier ausgewählter einzelner Wellenlängen.

5.2 Erste laserbasierte XCT-Messungen

Nach Fertigstellung und Charakterisierung der Quelle wurde zunächst der am Synchrotron bereits genutzte XCT-Aufbau wiederverwendet und an die neue Quelle angepasst. Der schematische Aufbau der laserbasierten XCT ist in Abb. 5.3 gezeigt. Der „Signal“-Strahl

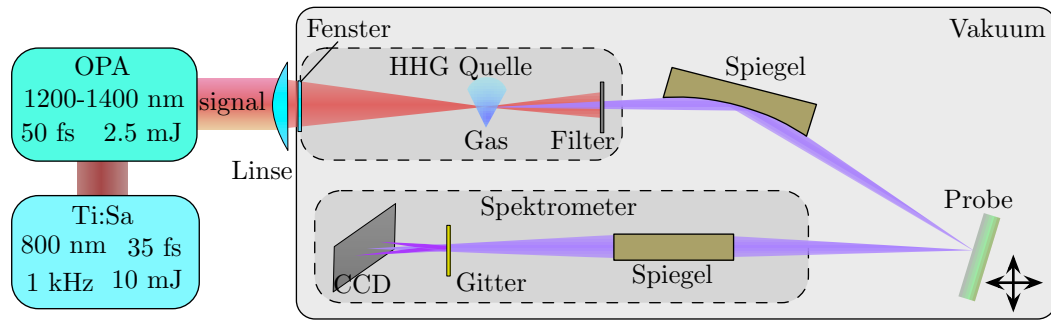


Abbildung 5.3: Struktur des laserbasierten XCT-Aufbaus: Ein Ti:Sa Laser wird benutzt, um einen optischen parametrischen Verstärker (OPA) zu pumpen (Durchschnittsleistung $P_A = 10$ W, Pulsenergie $E_P = 10$ mJ, Mittenwellenlänge $\lambda_0 = 800$ nm, Pulsdauer $t_P = 35$ fs). Der durchstimmbare „Signal“-Strahl des OPA (Durchschnittsleistung $P_A = 2.5$ W, Pulsenergie $E_P = 2.5$ mJ, Mittenwellenlänge $\lambda_0 = 1200$ nm – 1400 nm, Pulsdauer $t_P = 50$ fs) wird dann in ein mit Argon gefülltes Röhrchen fokussiert. Dabei werden hohe Harmonische der Grundfrequenz im XUV-Bereich erzeugt. Die Strahlung wird mit einer 200 nm dünnen Aluminiumfolie von der restlichen Laserstrahlung getrennt und mit einem toroidalen Spiegel ($f = 40$ cm) auf die Probe refokussiert. Danach wird die reflektierte Strahlung mit einem Spektrometer gemessen. Dazu wird der Reflexionspunkt auf eine CCD-Kamera abgebildet. Dazwischen trennt entweder ein Transmissions- oder ein Reflexionsgitter die XUV-Strahlung spektral auf. Die Probe kann lateral bewegt werden, um dreidimensionale Messungen zu ermöglichen.

des OPA wird in ein mit Argon gefülltes Röhrchen mit einer Linse ($f = 30$ cm) auf Peak-Intensitäten um $I_0 \approx 10^{13}$ W/cm² fokussiert. Die Ein- und Austrittsöffnung durch das Röhrchen werden vom Laser selbst gebohrt. Im Gas werden hohe Harmonische erzeugt. Die Phasenanpassungsbedingungen werden durch den Hintergrunddruck ($p_0 \approx 300$ mbar) im Röhrchen kontrolliert. Ein Foto der Interaktion des Lasers mit dem Gas ist im Anhang (siehe Abb. B.1) gezeigt.

Die XUV-Strahlung wird mit einer 200 nm dünnen Aluminiumfolie von der restlichen Laserstrahlung getrennt und mit einem toroidalen Spiegel ($f = 40$ cm) auf die Probe refokussiert. Danach wird die reflektierte Strahlung mit einem Transmissionsgitter-Spektrometer [111, 112] gemessen. Dazu wird der Reflexionspunkt mit einem zweiten toroidalen Spiegel ($f = 36$ cm) durch ein freistehendes Goldsteg-Gitter (1000 l/mm) auf eine CCD-Kamera (Andor Newton DO940P-BN) abgebildet. Aus den gemessenen reflektierten Spektren sowie der Referenzmessung auf einer bekannten Probe wird die Reflektivität der Probe bestimmt und daraus die Tiefenstruktur rekonstruiert. Ein Rasterscan über die lateralen Dimensionen durch Bewegung der Probe erlaubt dreidimensionale Messungen (B-Scans und Enface-Scans).

Die erste laserbasierte XCT-Messung und somit der Nachweis der Machbarkeit von laborbasierter XCT wurde an den gleichen Proben wie am Synchrotron durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abb. 5.4 dargestellt. Aufgrund der bereits beschriebenen Diffusionseffekte

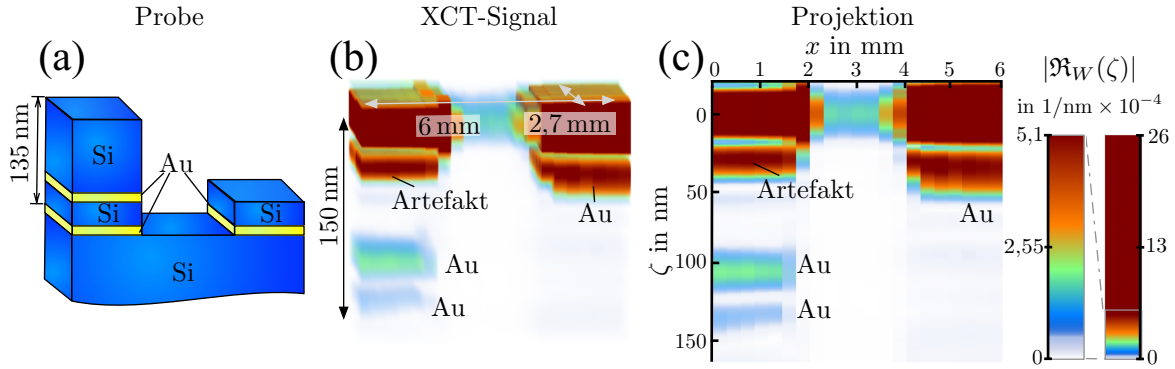


Abbildung 5.4: Dreidimensionale XCT-Messung an laserbasierter Quelle: Die in (a) schematisch dargestellte Probe wurde im Photonenenergiebereich von 35 eV – 71 eV an der laserbasierten XUV-Quelle mit XCT untersucht (TE-Polarisation). (b) zeigt eine mit Transparenzen gewichtete Falschfarbendarstellung des Tomogramms in Schrägsicht, während (c) eine mit derselben Farb- und Transparenzkodierung gewichtete Projektion zeigt. Das laterale Scanraster beträgt $300 \mu\text{m} \times 900 \mu\text{m}$. Die tatsächliche laterale Auflösung ist damit durch das Raster und nicht durch die Fokussierung begrenzt. Für das Tomogramm wurden $21 \times 4 = 84$ laterale Punkte (A-Scans) in insgesamt 157 Minuten (112 s pro A-Scan, davon 6×10 s Belichtungszeit) aufgenommen. Der automatische Wellenlängenscan war bei dieser Messung noch nicht implementiert, sodass alle Wellenlängen des OPA einzeln angefahren und aufgenommen werden mussten. Für die Rekonstruktion wurde ein Kaiser-Bessel-Fenster mit $\beta = 4$ eingesetzt und so eine axiale Auflösung von 28 nm erreicht. Wie auch am Synchrotron konnte die dreidimensionale Struktur der Probe rekonstruiert werden. Da die Oberfläche der Probe als Referenz dient, kann nur relativ zu dieser gemessen werden. Das Autokorrelationsartefakt ist in der Messung sehr deutlich zu erkennen.

von dünnen Goldschichten, waren die Proben mit hochreflektierender Deckschicht zur Unterdrückung der Artefakte zum Zeitpunkt der laserbasierten Messung nicht mehr intakt. Jede am Synchrotron vermessene Probe wurde jedoch sowohl mit als auch ohne Deckschicht hergestellt, sodass, abgesehen von Deckschicht und Herstellungstoleranzen, eine identische Probe (siehe Abb. 5.4a) vermessen werden konnte. Im Vergleich mit den am Synchrotron durchgeführten Messungen (Abb. 4.3) fällt auf, dass das Artefakt durch

das Fehlen der Deckschicht im Verhältnis zu den realen Schichten stärker ist. Außerdem ist die axiale Auflösung mit ca. 28 nm etwas schlechter als am Synchrotron (17 nm). Dies liegt an der zur Verfügung stehenden Bandbreite der Laserquelle. Die Quelle selbst erreicht Photonenenergien von über 100 eV [5]. Die notwendige Trennung der Laser- von der XUV-Strahlung mit einer dünnen Aluminiumfolie blockt jedoch Photonenenergien oberhalb der Aluminiumkante bei ca. 72,6 eV (siehe Abb. 5.5). Die volle Bandbreite der Quelle kann genutzt werden, indem eine zusätzliche Messung mit Filtern, die Energien oberhalb der Aluminiumkante transmittieren, durchgeführt wird. Dazu kann beispielsweise Zirkon verwendet werden (Silizium selber ist transparent bei 1300 nm). Die volle Bandbreite

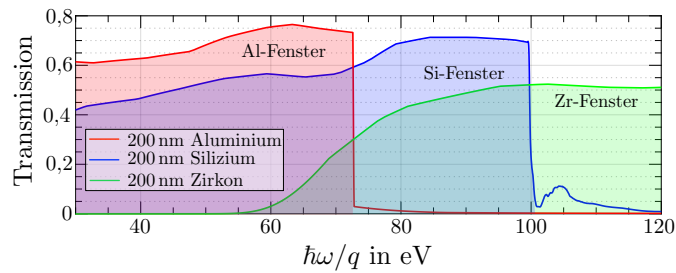


Abbildung 5.5: XUV-Transmission durch verschiedene Materialien: Die Transmission von XUV-Strahlung durch 200 nm-dicke Folien aus Silizium, Aluminium und Zirkon ist in Abhängigkeit der Photonenenergie dargestellt [25].

kann daher nur erreicht werden, indem die Spektren stückweise mit verschiedenen Filter aufgenommen und hinterher kombiniert werden. In späteren Versionen des XCT-Aufbaus wurden bereits Messungen mit mehreren Filtern durchgeführt und es konnte gezeigt werden, dass die axiale Auflösung bei Nutzung des vollen Silizium-Transmissionsfensters der Synchrotronauflösung entspricht [113]. Da die Filter jedoch manuell gewechselt werden müssen und die axiale Auflösung nur mit Aluminiumfilter für die Messung der bisherigen Proben ausreichend gut war, beschränken sich die in dieser Arbeit gezeigten Messergebnisse auf den Spektralbereich bis zur Aluminiumkante.

Für die in Abb. 5.4 gezeigte erstmalige Demonstration der laserbasierten XCT in drei Dimensionen [114] wurde eine laterale Diskretisierung der Messpunkte von 300 μm auf der langen und 900 μm auf der kurzen Seite gewählt und es wurden 84 laterale Punkte in einer Messzeit von 2 h 37 min aufgenommen. Zum Zeitpunkt der Messung war der Wellenlängenscans des OPA mit der Kamerabelichtung noch nicht synchronisiert, sodass pro lateralem Messpunkt sechs verschiedene Wellenlängen mit einer Belichtungszeit von 10 s einzeln angefahren, aufgenommen und im Anschluss kombiniert werden mussten. Deshalb betrug die Messdauer pro Punkt (für einen A-Scan) etwa 112 s. Die Belichtungszeit pro Einzel-Spektrum ist allerdings nur um eine Größenordnung länger (10 s statt 1 s) als bei der Synchrotronmessung (Abb. 4.3). Dies zeigt bereits, dass die laserbasierte Quelle konkurrenzfähig zum Synchrotron (zumindest in diesem Spektralbereich) ist. In späteren

XCT-Messkampagnen mit automatisierten und synchronisierten Wellenlängenscans konnte die Belichtungszeit auf 5 s pro lateralem Messpunkt verringert werden (siehe Kap. 6.2). Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass Belichtungszeiten von mehreren Minuten bis hin zu Stunden für dreidimensionale Messungen mit XUV-Mikroskopen nicht ungewöhnlich und eher die Regel als die Ausnahme sind [37, 47]. Mit stärkeren Quellen und schnelleren Detektoren (Ausleseraten) kann die Messzeit in Zukunft jedoch drastisch reduziert werden.

Für einen detaillierteren Vergleich zwischen synchrotronbasierter und laserbasierter XCT wurden einzelne Tiefenscans (A-Scans) mit beiden Verfahren auf zwei Proben ohne Deckschicht aufgenommen³¹. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.6 dargestellt. Es wurden eine

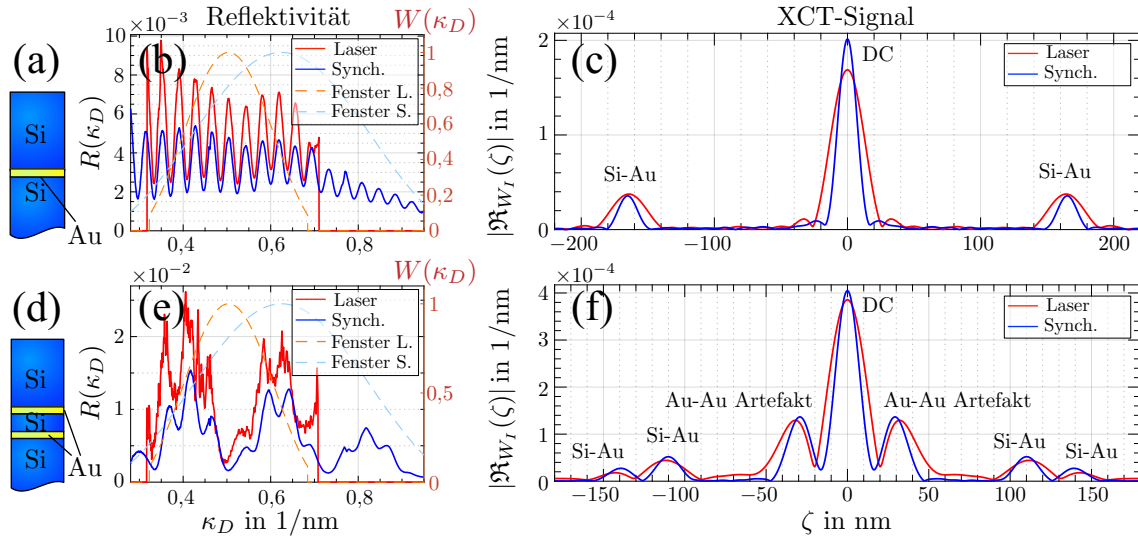


Abbildung 5.6: Vergleich zwischen synchrotronbasierten und laserbasierten XCT-Messungen: (b) zeigt die mit laser- und synchrotronbasierter Quelle gemessene Reflektivität (blau) der Probe (a), während (e) die gemessenen Reflektivitäten (blau) der Probe (d) darstellt. Für die Transformation der Spektren nach κ_D wurde in allen Fällen die Dispersion von Silizium verwendet. Die laserbasierten Messungen wurden im Fenster von 37 eV – 72 eV und die synchrotronbasierten Messungen zwischen 32 eV – 99 eV aufgenommen und jeweils mit einem Fenster ($\beta = 4$) gewichtet. (c) und (f) zeigen die zugehörigen XCT-Signale gewichtet mit dem Integral der Fourier-Transformation der Fensterfunktion. Die axialen Auflösungen sind 29 nm im Falle der laserbasierten und 15 nm im Falle der synchrotronbasierten Messung. Die Belichtungszeiten waren 20×20 s für (b)Laser, 10 s für (b)Synchrotron, 6×10 s für (e)Laser und 4 s für (e)Synchrotron.

einfache wenige Nanometer dünne vergrabene Goldschicht (Abb. 5.6a) sowie zwei vergrabene dünne Goldschichten (Abb. 5.6d) untersucht. Die Positionen der Schichten konnten in allen Fällen rekonstruiert werden und stimmen sehr gut überein. Die Abweichungen kommen einerseits durch die bereits angesprochenen Degradierungseffekte der Probe während der Lagerung zwischen den Messungen zu Stande. Andererseits führen Messfehler bei der spektralen Kalibrierung des Spektrometers und der Bestimmung des Einfallswinkels

³¹Da die Proben keine Deckschicht besitzen und so durch die Lagerung nicht zerstört wurden, konnten im Gegensatz zu den dreidimensionalen Messungen die tatsächlich gleichen Proben untersucht werden.

der Strahlung auf der Probe zu einer Abweichung der absoluten Tiefen³². Die axiale Auflösung der laserbasierten Messungen (≈ 29 nm) ist durch den eingesetzten Aluminiumfilter wiederum geringer als bei den synchrotronbasierten Messungen (≈ 15 nm). Aufgrund der unterschiedlichen Breiten der genutzten spektralen Fenster, sind auch die in Abb. 5.6b und e dargestellten Fensterfunktionen unterschiedlich. Das XCT-Signal entsteht aus der Faltung der tatsächlichen Probenresponse mit der Fourier-Transformation des Fensters (siehe Gl. 4.26). Damit die Amplitudenverläufe der synchrotron- und laserbasierten Messungen trotz der verschiedenen Fenster vergleichbar werden, wurde das eigentliche XCT-Signal noch mit dem Integral über die Fourier-Transformation der Fensterfunktion zwischen den ersten Nullstellen $\zeta_0^{(-1)}$ und $\zeta_0^{(1)}$ von $|\mathfrak{W}(\zeta)|$ gewichtet:

$$\mathfrak{R}_{w_I}(\zeta) = \frac{\mathfrak{R}_W(\zeta)}{\int_{\zeta_0^{(-1)}}^{\zeta_0^{(1)}} |\mathfrak{W}(\zeta)| \, d\zeta} . \quad (5.1)$$

Somit ist gewährleistet, dass das Integral (und nicht der Wert selbst) über ein zu einer Tiefe gehörenden Peak im XCT-Signal die halbe Modulationsamplitude der zugehörigen Frequenz im (ungefensterten) Spektrum ergibt³³. Dies führt dazu, dass, obwohl die Modulationsamplitude der Reflektivitäten bei der laserbasierten Messung größer sind, die Maxima der Peaks im XCT-Signal durch das schmalere Fenster irreführenderweise gut aufeinander liegen. Die Abweichung der Amplitudenverläufe sind wiederum auf die Degradierungseffekte der Proben sowie auf die spektrale Auflösung der eingesetzten Spektrometer zurückzuführen. Die Auswirkung der Spektrometerauflösung auf die Messergebnisse wird ausführlich in Kapitel 6.2.1 behandelt. Beim Vergleich der Qualität der aufgenommenen Reflektivitäten fällt auf, dass insbesondere bei der Probe mit zwei Goldschichten die Schwankungen der laserbasierten Messung wesentlich größer sind als bei der synchrotronbasierten Messung. Kleine Schwankungen der Laserintensität haben durch den nichtlinearen Konversionsprozess große Änderungen im Signal zur Folge, was die technisch umsetzbare Stabilität der Quelle begrenzt. Aufgrund der Fourier-Transformation verteilt sich die durch Laserleistungsschwankungen und Auslesen der CCD-Kamera entstehende Rauschintensität der Reflektivität aber auf den gesamten Tiefenbereich. Deshalb ist der Untergrund im XCT-Signal der laserbasierten Messung nur leicht gegenüber der synchrotronbasierten Messung angehoben. Dieses Verhalten des Signal-Rauschverhältnisses ist eine Eigenschaft der Fourier-Domain OCT [78] und ist insbesondere für die Bildgebung mit lasergetriebenen XUV-Quellen sehr vorteilhaft.

³²Eine detailliertere Auswertung der Genauigkeit der Tiefenbestimmung von XCT wird in Kapitel 6.2 vorgenommen.

³³Da das XCT-Signal symmetrisch ist, trägt jeder Halbraum nur die Hälfte der Gesamtleistung

6 Artefaktfreie XCT

Die im vorigen Kapitel 5 vorgestellten Ergebnisse demonstrieren, dass lasergetriebene XCT möglich ist und zum Synchrotron vergleichbare Ergebnisse erzielt werden können. Obwohl die axiale Struktur bereits im gezeigten Signal enthalten ist und ausgewertet werden kann, ist die Mehrdeutigkeit des Signals (die Artefakte sind deutlich sichtbar) aber ein erheblicher Nachteil, der das Anwendungspotential von XCT auf vorher bekannte Proben beschränkt. Deshalb war die Beseitigung der Artefakte, also die eindeutige Probenrekonstruktion, ein zentrales Ziel dieser Arbeit. Die bereits im ersten XCT-Konzept [1, 40] erdachte und am Synchrotron versuchte [7] Abschwächung der Artefakte durch eine hochreflektive Deckschicht auf den Proben ist zum einen nicht in der Lage, die Artefakte vollständig zu beseitigen und erwies sich zum anderen aufgrund von Diffusionseffekten und inselartigem Schichtwachstum zumindest für die bisher untersuchten Proben als ineffektiv. Außerdem bedeutet eine zusätzliche Beschichtung von Proben in vielen Fällen deren Zerstörung. Stattdessen wurden zwei weitere Ansätze zur Artefaktunterdrückung umgesetzt. Einerseits wurde das während dieser Arbeit entstandene überarbeitete laserbasierte XCT-Mikroskop so konzipiert, dass es um eine echte Referenz erweitert werden kann. Eine dünne Si_3N_4 -Membran sehr nah (einige 100 nm) an der Probenoberfläche dient sowohl als Strahlteiler als auch als Referenzspiegel. Durch die Möglichkeit, den Abstand der Membran einzustellen, können Artefakte komplett beseitigt werden. Da hierbei aber wiederum ein echtes Interferometer entsteht, müssen die damit einhergehenden technischen Probleme der Stabilität und Ausrichtung gelöst werden. Dies stellt im XUV-Bereich hohe Anforderungen an Motorisierung und Diagnostik. Das in Kapitel 7 vorgestellte und im Verlauf der Arbeit sukzessiv aufgebaute XCT-Mikroskop wurde unter diesen Gesichtspunkten entworfen und gebaut. Die Inbetriebnahme und die erstmalige Demonstration des Membran-Aufbaus sollen in naher Zukunft durchgeführt werden (8.1).

Im Gegensatz zu diesem technisch sehr anspruchsvollen und komplexen Ansatz basiert die zweite verfolgte Lösungsstrategie allein auf dem Einsatz von Algorithmen zur Korrektur der Artefakte. Ein Algorithmus, welcher die Autokorrelations-Artefakte zuverlässig beseitigt, bedarf keinerlei technischer Erweiterungen des Aufbaus. Damit blieben die Vorteile der herkömmlichen XCT ohne Strahlteiler hinsichtlich der Robustheit und Stabilität erhalten und auch bisher aufgenommenen Daten könnten damit verbessert werden. Ein solcher Algorithmus müsste in der Lage sein, eine Autokorrelation rückgängig zu machen, also ein Signal zu finden, von dem nur die Faltung mit sich selber bekannt ist. Dies ist ein mathematisch nichttriviales Problem. Für die Lösung dieses Problems wurde im Rahmen dieser Arbeit ein iterativer Algorithmus entwickelt und in der Programmiersprache *Matlab* implementiert.

6.1 Eindeutige XCT-Rekonstruktion

Für die Entwicklung des Algorithmus zur Beseitigung der Artefakte von XCT war es zunächst notwendig, das eigentlich zu lösende Problem exakt zu definieren. Zwei zentrale Fragen sind dabei zu beantworten: Wie sind die Informationen über die axiale Struktur einer Probe in deren Reflektivität eingebettet und können diese auch wieder eindeutig rekonstruiert werden? Die erste Frage wurde mit dem XCT-Modell in Kapitel 4.2 bereits beantwortet. Die komplexe Feldreflektivität eines beliebigen Schichtsystems bei Vorgabe der Schichtdicken und Brechzahlen wurde hergeleitet. Für die Beantwortung der zweiten Frage muss das inverse Problem gelöst werden. Kann aus der Reflektivität die axiale Struktur wieder rekonstruiert werden? Beim Blick auf die Struktur der Feldreflektivität aus Gleichung 4.20, welche hier der Übersichtlichkeit halber noch mal als Funktion von $\kappa_D(\omega)$ angegeben ist, wird deutlich, dass die Tiefeninformation komplett als lineare Phasenterme in den einzelnen Summanden eingebettet ist³⁴:

$$r(\kappa_D) \approx \sum_{j=1}^{N+1} r_j(\kappa_D) e^{i\kappa_D(z_j - z_1)} . \quad (6.1)$$

Deshalb kann die Tiefenstruktur durch eine einfache Fouriertransformation rekonstruiert werden. Die Methodik ist dabei analog zur in Kapitel 4.3 beschriebenen XCT-Rekonstruktion, welche wiederum auf der FD-OCT basiert. Der Unterschied besteht nur darin, dass hier statt der realen Intensitätsreflektivität die komplexe Feldreflektivität herangezogen wird. Es ist wiederum sinnvoll, eine Fensterfunktion zu definieren, die den Bereich, in dem $r(\kappa_D)$ bekannt ist, einschränkt. Um die letztendlich im Vergleich zur XCT-Auswertung selbe axiale Auflösung zu erhalten, wird die gleiche Fensterfunktion $W(\kappa_D)$ (siehe Gl. 4.25) verwendet. Es gilt:

$$r_W(\kappa_D) = W(\kappa_D) \cdot r(\kappa_D) . \quad (6.2)$$

Die Fourier-Transformation ergibt sich dann analog zum XCT-Signal in Gleichung 4.26 zu:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_W(\zeta) &= \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r_W(\kappa_D)] = \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r(\kappa_D) \cdot W(\kappa_D)] = \frac{1}{2\pi} \mathbf{r}(\zeta) * \mathfrak{W}(\zeta) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^{N+1} \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r_j(\kappa_D)] * \mathfrak{W}(\zeta - (z_j - z_1)) . \end{aligned} \quad (6.3)$$

Im Gegensatz zum XCT-Signal treten Maxima diesmal nur bei den tatsächlichen Tiefen auf. Die Auflösung ist wie im XCT-Signal hauptsächlich durch die Fourier-Transformation

³⁴Mehrfachreflexionen werden vernachlässigt.

des Fensters $\mathfrak{W}(\kappa_D)$ bestimmt. Sie wird jedoch durch die Faltung mit der Fourier-Transformation des Reflektivitätsverlaufs im Allgemeinen verringert. Abbildung 6.1 zeigt

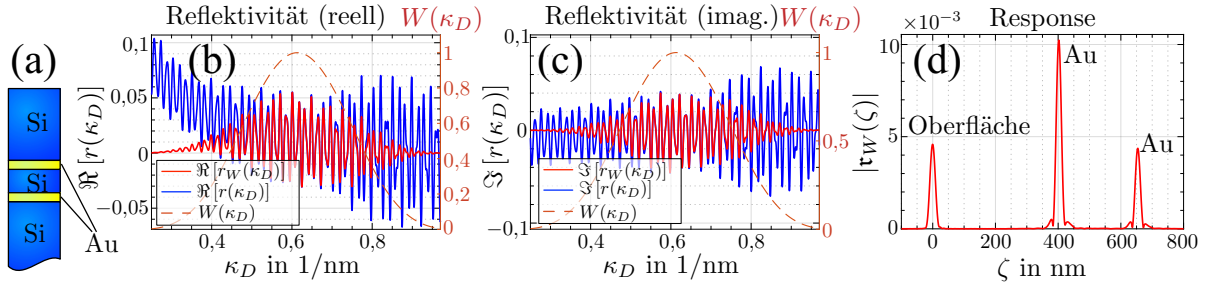


Abbildung 6.1: Simulierte komplexe Feld-Reflektivität einer Probe mit zwei vergrabenen Schichten: Der Realteil (b) und der Imaginärteil (c) (blau) der komplexen Feld-Reflektivität derselben Probe (a) wie in Abb. 4.2 wurden mit der Matrixmethode im Siliziumfenster (30 eV – 99 eV) simuliert. Für die Transformation nach κ_D wurde die Dispersion von Silizium verwendet. Zusätzlich werden auch die mit dem Fenster $W(\kappa_D)$ gewichteten Reflektivitäten dargestellt (rot) ($\beta = 8$). Die Rekonstruktion (die Proben-Response) ist in (d) gezeigt. Die Struktur kann exakt und artefaktfrei rekonstruiert werden.

die mit Hilfe der Matrixmethode simulierte komplexe Feldreflektivität des auch in Kapitel 4.3 verwendeten simulierten Schichtsystems (Abb. 6.1a) und dessen Rekonstruktion. Sowohl die Oberfläche als auch beide Goldschichten können eindeutig identifiziert werden.

Die Lösung des inversen Problems - die eindeutige Rekonstruktion der Tiefenstruktur aus der Reflektivität - ist also möglich, wenn statt der Intensitätsreflektivität die komplexe Feldreflektivität bekannt wäre. Zur vollständigen Klärung der Problemstellung muss nun noch der Zusammenhang zwischen dem mehrdeutigen XCT-Signal $\mathfrak{R}_W(\zeta)$ und der hergeleiteten eindeutig rekonstruierbaren Fourier-Transformation $\mathfrak{r}_W(\zeta)$ hergestellt werden. Für das XCT-Signal gilt mit der reellen Fensterfunktion $w(\kappa_D) = \sqrt{W(\kappa_D)}$:

$$\begin{aligned} \mathfrak{R}_W(\zeta) &= \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [R_W(\kappa_D)] = \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [R(\kappa_D) \cdot W(\kappa_D)] = \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [|r(\kappa_D)|^2 \cdot w^2(\kappa_D)] \\ &= \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r_w^*(\kappa_D) \cdot r_w(\kappa_D)] = \frac{1}{2\pi} \mathfrak{r}_w^*(-\zeta) * \mathfrak{r}_w(\zeta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{r}_w^*(\zeta') \mathfrak{r}_w(\zeta' + \zeta) d\zeta' \\ &= \frac{1}{2\pi} \mathcal{AK}_I [\mathfrak{r}_w(\zeta)] = \frac{1}{4\pi^2} \mathcal{AK}_I [\mathfrak{r}_W(\zeta)] * \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} \left[\frac{1}{W(\kappa_D)} \right]. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Dabei ist \mathcal{AK}_I die Impulsautokorrelation im Ort. Sie ist ähnlich zur Autokorrelationsfunktion $\Gamma(\tau)$ in zeitlicher Mittelung. Jedoch liefert die Impulsautokorrelationsfunktion im Gegensatz zur Autokorrelationsfunktion für Signale mit endlicher Energie, wie eben in diesem Fall für das endliche nicht stationäre $\mathfrak{r}_W(\zeta)$, einen Wert der ungleich 0 ist. Für stationäre Signale mit unendlichem Energiegehalt (wie in Kapitel 3.2.2 abgehandelt) existiert die Impulsautokorrelation hingegen nicht, da das Integral dann nicht konvergiert. In diesem Zusammenhang sei darauf hingewiesen, dass es an vielen Stellen in der Literatur vorkommt, dass die allein auf dem Faltungstheorem basierte Herleitung in Gleichung 6.4

als Wiener-Khinchin-Theorem (WKT) (siehe Abschnitt 3.2.4) bezeichnet bzw. begründet wird. Die eigentliche Aussage des WKT ist aber eine andere. So beschreibt es den allgemeingültigen Zusammenhang zwischen spektraler Intensitätsdichte und Autokorrelationsfunktion für statistisch gemittelte ($\langle \cdot \rangle$) Messgrößen. Es gilt unabhängig von der Ausgestaltung der Mittelung (siehe auch Anhang A.4) für alle Arten von Signalen eben auch gerade solcher, deren Fourier-Transformationen nicht konvergieren (unendlicher Energiegehalt).

Das zu lösende Problem bei der Beseitigung der Mehrdeutigkeiten im XCT-Signal besteht, wie Gleichung 6.4 zeigt, also darin, ob und wie die komplexe Feldreflektivität der Probe $r_W(\kappa_D)$ aus der gemessenen realen Intensitätsreflektivität $R_W(\kappa_D) = |r_W(\kappa_D)|^2 / W(\kappa_D)$ algorithmisch rekonstruiert werden kann - oder anders ausgedrückt: Kann die Phase $\arg[r_W(\kappa_D)]$ der komplexwertigen Funktion $r_W(\kappa_D)$ bei alleiniger Kenntnis der Amplituden $|r_W(\kappa_D)|$ rekonstruiert werden³⁵?

$$\begin{aligned}
 \text{Aus } R_W(\kappa_D) &= \frac{|r_W(\kappa_D)|^2}{W(\kappa_D)} \\
 \text{mit } \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1}[R_W(\kappa_D)] &= \frac{1}{4\pi^2} \mathcal{AK}_I[\mathfrak{r}_W(\zeta)] * \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1}\left[\frac{1}{W(\kappa_D)}\right] \\
 \text{rekonstruiere } r_W(\kappa_D) &= |r_W(\kappa_D)| e^{i \arg[r_W(\kappa_D)]}, \\
 \text{was equivalent ist zu } \mathfrak{r}_W(\zeta) &= \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1}[r_W(\kappa_D)] = |\mathfrak{r}_W(\zeta)| e^{i \arg[\mathfrak{r}_W(\zeta)]}. \quad (6.5)
 \end{aligned}$$

Derartige inverse Probleme treten in der Optik häufiger auf, da bei intensitätsbasierten Messungen die Phaseninformation typischerweise verloren geht. Algorithmen zur Rekonstruktion der Phase - sogenannte „Phase-Retrieval“-Algorithmen (PR) - existieren für verschiedene Anwendungen in großer Anzahl [65, 115–118]. Sie werden in der computergestützten Holographie [119] und in der linsenlosen Bildgebung wie dem Coherent-Diffraction-Imaging [9] verwendet, um beispielsweise aus zweidimensionalen räumlichen Beugungsmustern eines bestrahlten Objekts die Phasen und damit die Objektstruktur zu rekonstruieren. Betrachtet man das Phasenrekonstruktionsproblem algorithmisch - sprich diskret für ein endliches Fenster mit endlicher Sampleanzahl - wird klar, dass ein stark unterbestimmtes Gleichungssystem gelöst werden muss. Da nur die Amplituden im Frequenzraum (hier κ_D) vorgegeben werden, bleiben die Parameter der Phase frei wählbar. Es gibt also im Allgemeinen unendlich viele Lösungen für das Gleichungssystem. Ohne weitere Vorgaben und Einschränkungen des Lösungsraumes ist das Problem deshalb nicht eindeutig lösbar. In den existierenden Algorithmen werden deshalb nur Objekte als Lösung

³⁵Die Festlegung auf die Rekonstruktion von $r_W(\kappa_D)$ anstelle von $r_w(\kappa_D)$ führt zu einer Inkonsistenz, die durch die Division mit der Filterfunktion $W(\kappa_D)$ ausgeglichen werden muss. Im Gegenzug ist jedoch die letztendliche Auflösung, also die Breite der einzelnen Signalpeaks von $\mathfrak{r}_W(\zeta)$, gleich der Auflösung im ursprünglichen XCT-Signal $\mathfrak{R}_W(\zeta)$.

zugelassen, die lediglich in einem kleinen Bereich ungleich null sind. Damit das jedoch gilt, muss das streuende Objekt im Bereich der Beleuchtung auch beschränkt (also kleiner als der Beleuchtungsbereich) sein³⁶. Zusätzlich zu dieser Einschränkung kommen im Falle von mehrdimensionalen Phasenrekonstruktionsproblemen noch Symmetrieeigenschaften der mehrdimensionalen Autokorrelation hinzu, die den Lösungsraum noch einmal drastisch einschränken. Es lässt sich dann tatsächlich zeigen [65], dass im mehrdimensionalen Fall unter obigen Voraussetzungen die Lösung des Problems bis auf triviale Mehrdeutigkeiten (Verschiebung und Spiegelung des Objektes) eindeutig werden kann. Das für den Fall von XCT zu lösende Phasenproblem ist jedoch eindimensional. Die entsprechenden Symmetrien der Autokorrelationsfunktion, welche im mehrdimensionalen Fall den Lösungsraum entscheidend einschränken, gibt es im eindimensionalen Fall nicht [120]. Deshalb existiert für das Problem selbst bei entsprechender Einschränkung des Objekts, für XCT also des Signals $\mathbf{r}_W(\zeta)$, keine eindeutige Lösung [120]. Daher können bestehende iterative Algorithmen für das mehrdimensionale Problem wie Gerchberg-Saxton [115] (GS) oder Hybrid-Input-Output [116] (HIO) die auf eine Dimension angepasst wurden, nicht zur tatsächlich richtigen Lösung konvergieren. Je nach Wahl der Phasen (meist zufällig) bei der ersten Iteration, konvergieren die Algorithmen zu verschiedenen Lösungen. Die Wahrscheinlichkeit zur physikalisch richtigen Lösung zu konvergieren ist aber aufgrund der großen Anzahl an möglichen Lösungen extrem gering.

Für das im Falle von XCT zu lösende Phasenrekonstruktionsproblem bestand die Herausforderung darin, einen Algorithmus zu entwickeln, der trotz der großen Anzahl möglicher Lösungen zur physikalisch richtigen konvergiert. Dem gesamten Verfahren, bestehend aus Messung und algorithmischer Auswertung, wurde der Name Phasenrekonstruktions-XCT oder kurz PR-XCT gegeben.

6.1.1 Eindimensionale Phasenrekonstruktion - PR-XCT

Wie in [120] gezeigt, führt im eindimensionalen Fall die Beschränkung auf nichtnegative reelle Signale zwar nicht zwingend zur Eindeutigkeit der Lösung (ohne Berücksichtigung trivialer Mehrdeutigkeiten), jedoch kann die Anzahl an Lösungen verringert und so die Wahrscheinlichkeit erhöht werden, die richtige Lösung zu finden. Nun ist aber die zu rekonstruierende komplexe Tiefenresponsefunktion $\mathbf{r}_W(\kappa_D)$ aufgrund ihrer physikalischen Bedeutung aber gerade nicht nichtnegativ und reell. Derartige Einschränkungen dürfen deshalb für die letztendliche Lösung nicht gelten. Es wurde deshalb ein auf dem GS- bzw. HIO-Verfahren basierender schrittweiser Algorithmus entwickelt, der die Einschränkungen von „nichtnegativ und reell“ zu „vollständig komplex“ stufenweise lockert, um so die

³⁶Beim Ptychographie-Verfahren [10] muss diese Bedingung nicht mehr zwingend erfüllt werden, da dort durch mehrere Aufnahmen des Streubildes mit leicht verschobener Beleuchtung Redundanzen erzeugt und so der Lösungsraum entsprechend eingeengt wird.

Konvergenz zur richtigen Lösung zu erzielen.

Im ersten Schritt des Algorithmus wird versucht, ein nichtnegatives reelles Signal zu rekonstruieren, da hier die Anzahl der möglichen Lösungen am geringsten ist. Jedoch sind die spektralen Amplituden eines solchen Signals durch die Regeln der Fourier-Transformation zwingend symmetrisch um Null. Es ist daher nicht möglich, mit den gemessenen spektralen Amplituden $|r_W(\kappa_D)|$, die keine Symmetrien enthalten, ein solches Signal zu generieren. Deshalb kann die gemessene Reflektivität für den ersten Schritt nicht als Ausgangswert verwendet werden. Stattdessen wird eine symmetrisierte Version $R_{W\text{sym}}(\kappa_D)$ der gemessenen Reflektivität verwendet, die wie folgt berechnet wird:

$$R_{W\text{sym}}(\kappa_D) = |\mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta} [| \Re_W(\zeta) |]| = \left| \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta} \left[\left| \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [R_W(\kappa_D)] \right| \right] \right|. \quad (6.6)$$

Anders ausgedrückt wird also der Betrag des ursprünglichen XCT-Signals $\Re_W(\zeta)$ zurücktransformiert und davon wieder der Betrag gebildet. Im ersten Schritt des Algorithmus wird also zusammengefasst, anstelle des ursprünglichen Problems, folgende Fragestellung bearbeitet:

$$\begin{aligned} \text{Aus } R_{W\text{sym}}(\kappa_D) &= \frac{|r_{W\text{sym}}(\kappa_D)|^2}{W_{\text{sym}}(\kappa_D)} = \left| \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta} \left[\left| \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [R_W(\kappa_D)] \right| \right] \right| \\ \text{mit } \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [R_{W\text{sym}}(\kappa_D)] &\approx \frac{1}{4\pi^2} \mathcal{AK}_1 [\mathfrak{r}_{W\text{sym}}(\zeta)] * \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} \left[\frac{1}{W_{\text{sym}}(\kappa_D)} \right] \\ \text{rekonstruiere } r_{W\text{sym}}(\kappa_D) &= |r_{W\text{sym}}(\kappa_D)| e^{i \arg[r_{W\text{sym}}(\kappa_D)]}, \\ \text{was equivalent ist zu } \mathfrak{r}_{W\text{sym}}(\zeta) &= \mathcal{FT}_{\kappa_D, \zeta}^{-1} [r_{W\text{sym}}(\kappa_D)] = |\mathfrak{r}_{W\text{sym}}(\zeta)| e^{i \arg[\mathfrak{r}_{W\text{sym}}(\zeta)]}, \\ \text{unter der Bedingung } \mathfrak{r}_{W\text{sym}}(\zeta) &\in \mathbb{R}_0^+. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Dabei ist $W_{\text{sym}}(\kappa_D)$ die um 0 symmetrische Version der ursprünglichen Fensterfunktion mit $\eta = \kappa_{D,\text{max}} - \kappa_{D,\text{min}}$ und $\gamma = (\kappa_{D,\text{max}} + \kappa_{D,\text{min}})/2$:

$$W_{\text{sym}}(k_D) = \begin{cases} W(\kappa_D + \gamma) & \text{für } -\frac{\eta}{2} \leq k_D \leq \frac{\eta}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (6.8)$$

Da die symmetrisierte Reflektivität selbst eine nichtnegative reelle Funktion ist, ist die Autokorrelation zwar symmetrisch aber nicht zwingend positiv. Daher gilt der Zusammenhang in 6.7 zwischen der Autokorrelation des gesuchten reellen und nichtnegativen Signals $\mathfrak{r}_{W\text{sym}}(\zeta)$ und der Fourier-Transformation von $R_{W\text{sym}}$ nur näherungsweise. Im Allgemeinen sind die Abweichungen im vorliegenden Fall klein, da sich zum einen durch den physikalischen Interferenzcharakter des Signals (siehe Kap.4.3) Dispersions- also Phaseneffekte der einzelnen Schichten direkt in den Amplituden widerspiegeln und zum anderen die Brechzahlen der meisten Materialien im XUV sehr nah an 1 liegen und so die

Phaseneffekte zusätzlich klein sind. Aus demselben Grund ist das reelle und nichtnegative Signal $\mathbf{r}_{W_{\text{sym}}}(\zeta)$ eine gute Approximation für die Amplitude des letztendlich gesuchten komplexen Signals $\mathbf{r}_W(\zeta)$.

Der erste Schritt des Algorithmus nutzt eine Kombination aus dem GS- und dem HIO-Verfahren, um $\mathbf{r}_{W_{\text{sym}}}(\zeta)$ zu rekonstruieren. Der Ablauf ist in Abbildung 6.2 gezeigt. Die Startwerte für die spektrale Phase werden zufällig gewählt. Wie oben beschrieben, ist

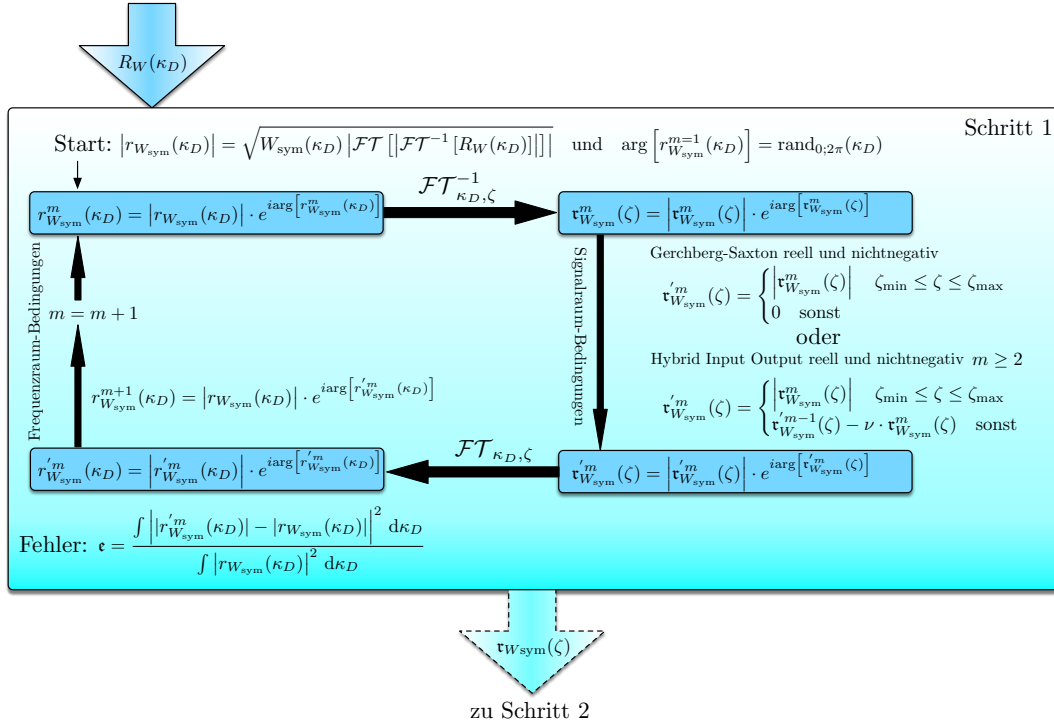


Abbildung 6.2: Erster Schritt des PR-XCT-Algorithmus: Die symmetrisierte Reflektivität $r_{W_{\text{sym}}}(\kappa_D)$ wird verwendet, um ein nichtnegatives und reelles Signal $\mathbf{r}_{W_{\text{sym}}}(\zeta)$ zu rekonstruieren.

die Wahl der Beschränkungen für das Signal essenziell für die Konvergenz. Im Signalraum werden deshalb im Falle des GS-Verfahrens nichtnegative und reelle Werte ungleich Null nur im Bereich ζ_{\min} bis ζ_{\max} zugelassen. Im Falle des HIO-Verfahrens wird im Bereich außerhalb des zugelassenen Gebietes das im vorigen Iterationsschritt erhaltene Signal negativ zurückgekoppelt (siehe Abb. 6.2). Dadurch kann die Konvergenzgeschwindigkeit sowie die Wahrscheinlichkeit erhöht werden, lokale Minima wieder verlassen zu können, um zum globalen Minimum, also der Lösung zu konvergieren. Nur die Breite des zugelassenen Bereiches $\zeta_{\max} - \zeta_{\min}$ ist entscheidend für die Konvergenz. Die absoluten Werte spielen aufgrund der Translationsinvarianz des Problems (triviale Mehrdeutigkeit der Verschiebung des Signals durch eine zufällige lineare spektrale Phase) keine Rolle. Die Breite wird auf einen Wert festgelegt, der etwas größer ist, als die halbe Breite des ursprünglichen XCT-Signals (Autokorrelation) $\mathfrak{R}_W(\zeta)$. Damit sichergestellt wird, dass die erhaltene Lösung außerhalb des zugelassenen Bereichs keine Werte besitzt (gleich null ist), wird in den ersten und letzten 10% der Iterationsschritte das GS-Verfahren angewendet. Für die

restlichen Iterationen kann das HIO-Verfahren mit entsprechender Rückkoppelkonstante ν benutzt werden. Zur Überwachung der Konvergenz und zum Einschätzen der Qualität der erhaltenen Lösung wird eine normalisierte Fehlerfunktion ϵ verwendet (siehe Abb. 6.2).

Zur Veranschaulichung der Funktionsweise des PR-XCT-Algorithmus wurde er auf das bereits mehrfach beschriebene Beispiel zweier vergrabener Goldschichten angewendet. Als Eingabe dient die mit der Matrix-Methode simulierte Intensitätsreflektivität $R(\omega)$, welche wie beschrieben mit der Dispersion von Silizium und dem Kaiser-Bessel-Fenster $W(\kappa_D)$ nach $R_W(\kappa_D)$ transformiert wird. Da durch die Simulation die spektrale Phase bekannt ist, können die Ergebnisse der Rekonstruktion entsprechend bewertet werden. Abbildung 6.3 zeigt die symmetrisierte Reflektivität $r_{W_{\text{sym}}}(\kappa_D)$, deren Phase im ersten Schritt des Algorithmus rekonstruiert wurde, mit und ohne die zusätzliche Fensterfunktion $W_{\text{sym}}(\kappa_D)$. 400 Iterationen waren notwendig, um das ebenfalls dargestellte zugehörige nichtnegative

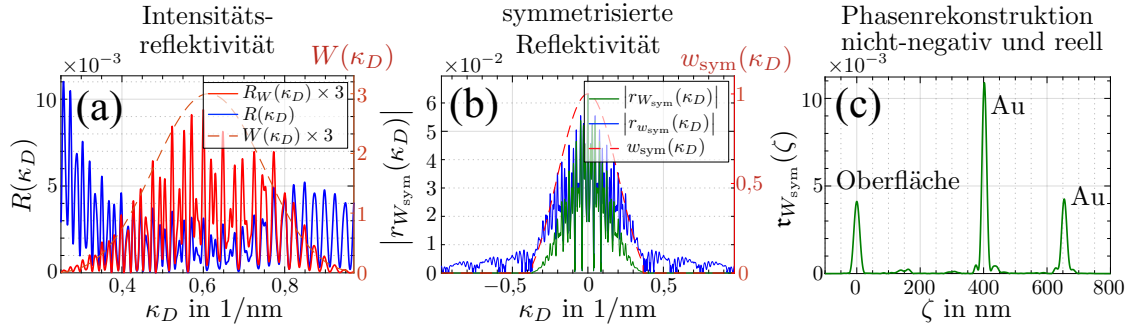


Abbildung 6.3: Symmetrisierte Reflektivität und Ergebnis des ersten Schrittes von PR-XCT: (b) zeigt die symmetrisierte Reflektivität $r_{W_{\text{sym}}}$ sowie das zusätzlich mit dem Fenster gewichtete $r_{W_{\text{sym}}}$ der simulierten Reflektivität (a) einer Probe mit 2 Goldschichten. (c) zeigt das Ergebnis des ersten Schrittes des PR-XCT-Algorithmus nach 400 Iterationen (GS in ersten und letzten 40 Iterationen; HIO mit $\nu = 0,8$ in den restlichen) bei einem Fehler von $\epsilon = 1,01 \cdot 10^{-3}$. Das Signal ist bereits eine gute Näherung der Amplitude der letztendlich gesuchten komplexen Proben-Response.

und reelle Signal $t_{W_{\text{sym}}}(\zeta)$ mit einem Fehler von $\epsilon = 1,01 \cdot 10^{-3}$ zu rekonstruieren. Die rekonstruierte Struktur ist, wie gewünscht, bereits nah an der tatsächlichen Probenstruktur, enthält jedoch noch keinerlei Phaseninformation. Die bereits beschriebene verbleibende Mehrdeutigkeit bei der Lösung führt dazu, dass das Signal auf der Tiefenachse beliebig verschoben (zufällige lineare spektrale Phase) und zusätzlich gespiegelt (komplex konjugierte spektrale Phase) sein kann. Diese Effekte wurden für die Darstellung manuell korrigiert, sodass die Oberfläche der Struktur bei einer Position von $\zeta = 0$ liegt.

Der zweite Schritt des PR-XCT-Algorithmus, dessen Ablauf in Abbildung 6.4 gezeigt ist, durchläuft weitere Iterationen, um eine gute Approximation $\arg_{\text{sym}}[r_W(\kappa_D)]$ der letztendlich gesuchten spektralen Phase $\arg[r_W(\kappa_D)]$ zu errechnen. Dazu wird diesmal die tatsächlich gemessene Feldreflektivitäts-Amplitude $|r_W(\kappa_D)|$ anstelle der symmetrisierten

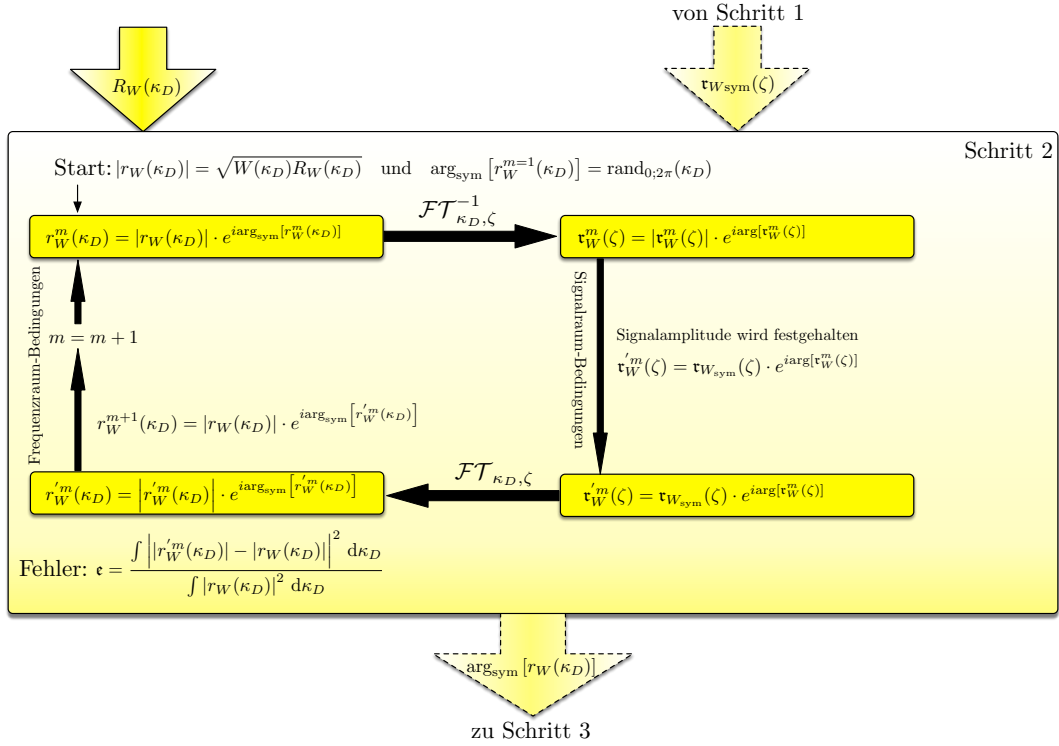


Abbildung 6.4: Zweiter Schritt des PR-XCT-Algorithmus: Die gemessene Feldreflektivitäts-Amplitude $|r_W(\kappa_D)|$ wird verwendet, um einen guten Schätzwert $\arg_{\text{sym}}[r_W(\kappa_D)]$ der tatsächlichen spektralen Phase $\arg[r_W(\kappa_D)]$ zu erhalten. Dazu werden sowohl im Frequenz- als auch im Signalraum die Amplituden festgehalten.

Reflektivität als Bedingung im Frequenzraum verwendet. Im Signalraum wird die Amplitude durch das im vorigen Schritt gewonnene nichtnegative und reelle Signal $\tau_{W_{\text{sym}}}(\zeta)$ ebenfalls festgehalten. Damit entfallen weitere Bedingungen wie bei GS oder HIO vollständig. Da beide Amplituden im Signal- und Frequenzraum fest sind, werden im zweiten Schritt nur Phasenterme rekonstruiert. In der ersten Iteration wird dazu eine zufällige Startphase gewählt. Die so gewonnene approximierte spektrale Phase $\arg_{\text{sym}}[r_W(\kappa_D)]$ wird schließlich dem in Abbildung 6.5 gezeigten dritten und letzten Schritt des Algorithmus als Start-Phase zugeführt, bei dem weder Amplitude noch Phase im Signalraum festgehalten werden und wieder GS- bzw. HIO-Bedingungen zum Einsatz kommen. Die Amplitude im Frequenzraum bleibt natürlich weiterhin durch die gemessene Reflektivität bestimmt. Das letztendliche Ergebnis des gesamten Algorithmus, also die rekonstruierte komplexe Feldreflektivität der Probe, ist in Abbildung 6.6 dargestellt. Der letztendliche Amplitudenfehler im Spektrum beträgt $\epsilon = 8,6 \cdot 10^{-7}$ und wurde nach 100 Iterationen im zweiten Schritt und 500 Iterationen im dritten Schritt erreicht. Für den dritten Schritt wurden in diesem Beispiel nur GS-Bedingungen verwendet, da die Konvergenz ausreichend schnell und stabil war. Da sowohl im ersten als auch im zweiten Schritt die Startphasen zufällig gewählt werden und aufgrund der vielen existierenden Lösungen, kann es vorkommen, dass in den ersten beiden Schritten nicht die physikalisch sinnvolle und somit unnütze

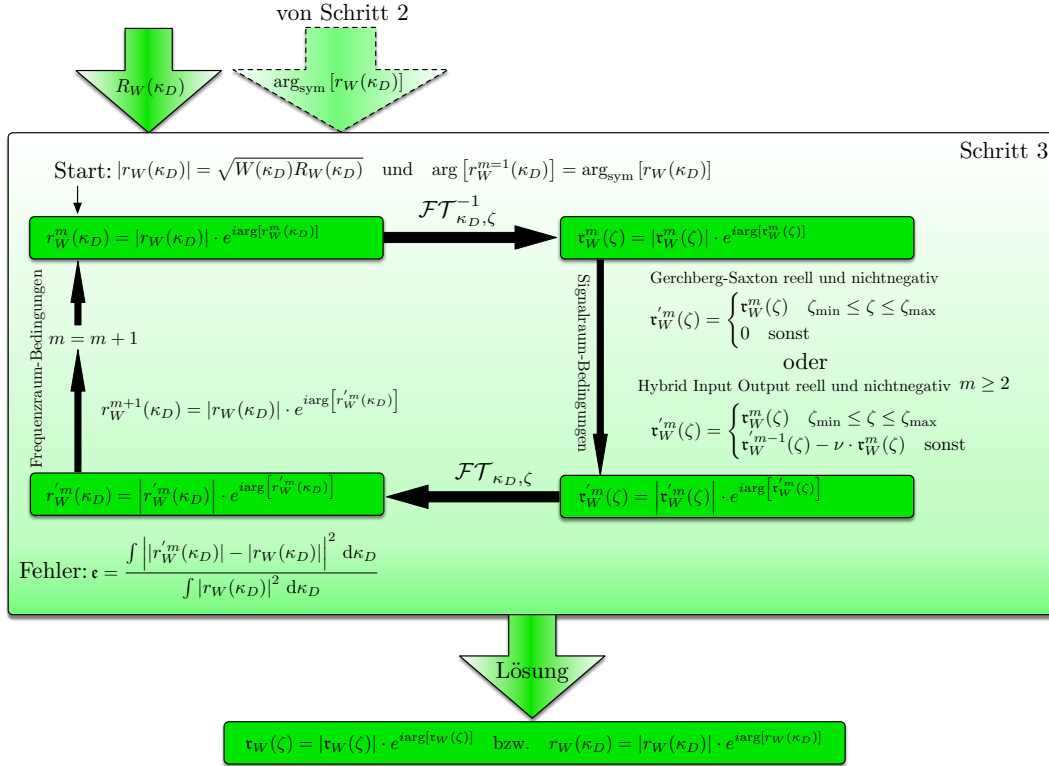


Abbildung 6.5: Dritter Schritt des PR-XCT-Algorithmus: Die gemessene Feldreflektivitäts-Amplitude $|r_W(\kappa_D)|$ und die Approximation der spektralen Phase $\arg_{\text{sym}}[r_W(\kappa_D)]$ aus Schritt 2 wird verwendet, um zur vollständig komplexen Lösung $r_W(\zeta)$ zu gelangen.

Lösung gefunden wird. Deshalb wurden die ersten beiden Schritte fünfmal wiederholt, um die Wahrscheinlichkeit, die richtige Lösung zu finden, auf ein ausreichendes Maß zu erhöhen. Die Lösungen werden anhand ihres Fehlers ϵ nach dem zweiten Schritt beurteilt. Es wurde nur diejenige Lösung im dritten Schritt vollständig rekonstruiert, welche den geringsten Fehler hatte. Bei allen bisher durchgeführten Rekonstruktionen war die Lösung mit dem kleinsten Fehler nach Schritt 2 auch immer die physikalisch sinnvolle.

Da in der Simulation durch die Matrixmethode die volle spektrale Phase der Feldreflektivität bekannt ist, kann diese mit der rekonstruierten Phase verglichen werden. Dazu ist in Abbildung 6.6 jeweils der Real- und Imaginärteil (6.6b und c) als auch die Amplitude (6.6a) dargestellt. Die Amplituden stimmen, wie durch die Konstruktion des Algorithmus und den geringen Fehler zu erwarten, sehr gut überein. Interessanter sind die im wesentlichen mit dem tatsächlichen Signal übereinstimmenden Verläufe von Real- und Imaginärteil, in welche die rekonstruierte Phase einfließt. Noch deutlicher wird die hohe Qualität der Rekonstruktion bei der Betrachtung des Amplitudenverlaufs der rekonstruierten Struktur. Die Verläufe liegen fast perfekt aufeinander. Insbesondere ist Autokorrelations-Artefakt nahezu beseitigt. Auch die absoluten Höhen und Positionen der Peaks, welche den Reflektivitäten und Tiefen der einzelnen Schichten entsprechen, stimmen sehr genau überein. Selbst die kleinen Dispersionseffekte des Goldes, die an den Schultern

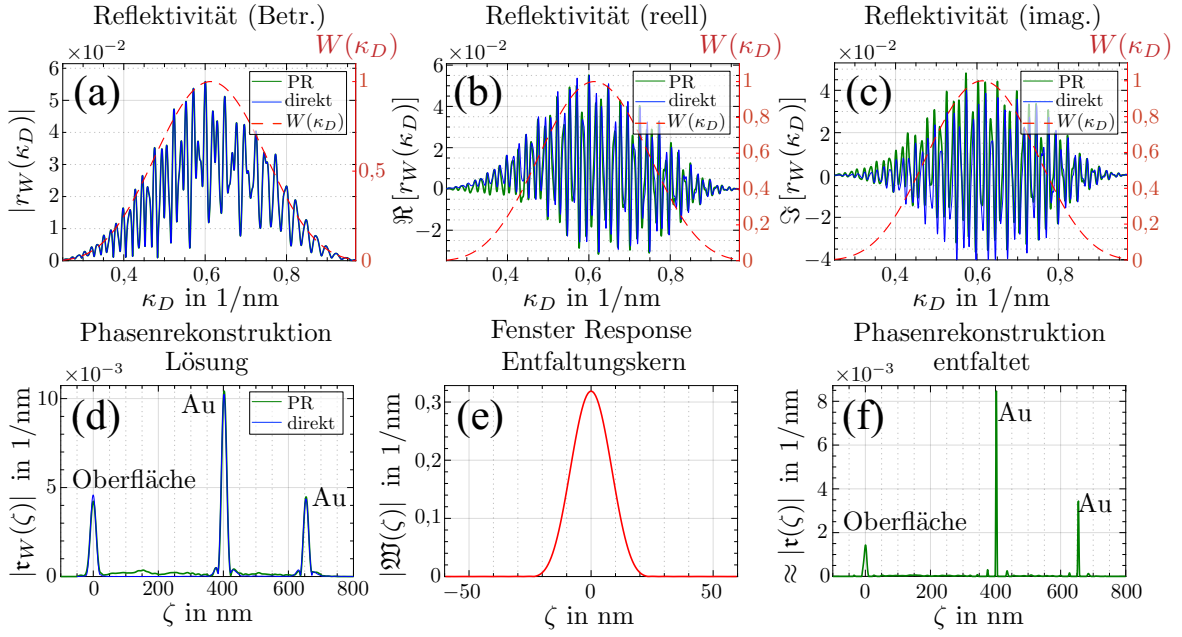


Abbildung 6.6: Rekonstruktion einer simulierten Probe mit dem PR-XCT-Algorithmus:

Die Abbildung zeigt das Ergebnis des PR-XCT-Algorithmus nach Schritt 3 (Schritt 1: 400 Iter., Schritt 2: 100 Iter., Schritt 3: 400 Iter.). Die Rekonstruktion (grün) wird mit dem tatsächlichen durch die Simulation bekannten Ergebnis (blau) verglichen. Die Amplitude der Feldreflektivität (a) sowie ihr Real- (b) und Imaginärteil (c) wurden mit hoher Übereinstimmung rekonstruiert. Die Amplitude der rekonstruierten komplexen Proben-Response (d) entspricht der gesuchten eindeutigen Tiefenstruktur der Probe. Das Artefakt ist beinahe komplett beseitigt. Der Fehler des PR-XCT-Algorithmus nach der letzten Iteration beträgt $\epsilon = 8,61 \cdot 10^{-7}$. (f) zeigt die mit dem Kern (e) durch den Lucy-Richardson-Entfaltungsalgorithmus [121, 122] (30 Iterationen) entfaltete Probenresponse, welche die Positionen der einzelnen Goldschichten sehr genau wiedergibt. (Abbildung adaptiert aus [6])

der beiden zu den Goldschichten gehörenden Maxima in Abb. 6.6d sichtbar sind, wurden mit hoher Güte rekonstruiert. Durch das Fehlen der Seitenmaxima bei dem zur Oberfläche gehörenden Signal wird deutlich, dass es sich hierbei nicht um Fourier-Überschwinger der Fensterfunktion handelt. Es sei an dieser Stelle noch einmal darauf hingewiesen, dass bis auf die Dispersion des dominanten Materials (Silizium) keine weiteren Informationen über die Probe, insbesondere nicht die Position des Artefaktes in den Algorithmus eingeflossen sind. Selbst die Kenntnis über die Dispersion des dominanten Materials ist nicht zwingend erforderlich.

Entfaltung des Signals vom spektralen Fenster

Die rekonstruierte (wie auch tatsächliche) Lösung ist von ihrer Struktur her eine Faltung, da durch den verwendeten Fourierfilter bzw. durch die Festlegung der Bandbreite die eigentliche Probenantwort-Funktion (Response-Funktion) $\mathbf{r}(\zeta)$ noch durch die Fourier-Transformation des Filters $\mathfrak{W}(\zeta)$ verbreitert wird (siehe Gleichung 6.3). Im dispersionsfreien Fall besteht die eigentliche Probenantwort-Funktion $\mathbf{r}(\zeta)$ aus der Summe von

Deltadistributionen an den jeweiligen Tiefen der Grenzschichten in der Probe. Um sie durch Fourier-Transformation exakt zu berechnen, müsste die Feldreflektivität im kompletten (positiven) κ_D -Raum bekannt sein. Eine Messung ist aber nur in einem endlichen Bandbreitenbereich möglich. Dies ist in der Simulation durch die Fensterfunktion umgesetzt, die außerhalb des zugelassenen Intervalls auf Null gesetzt wird. Die maximal erreichbare Auflösung, sprich die Breite der Peaks, die zu einer Grenzschicht gehören, ist also, wie bereits bekannt, hauptsächlich durch die Breite der Fourier-Transformation des Fensters $\mathfrak{W}(\zeta)$ (hier ca 19 nm) und somit letztendlich durch die Bandbreite des Spektrums bestimmt. Zusätzlich sorgt die Dispersion ebenfalls für eine Verbreiterung der Maxima und damit für eine weitere Verringerung der Auflösung. Die durch die Transformation nach κ_D eingeführte Dispersionskorrektur behebt allerdings die Verbreiterung, die durch die Dispersion des dominanten Materials (hier Silizium) hervorgerufen wird. Unter der Annahme, dass alle auftretenden Maxima von $\mathfrak{r}_W(\zeta)$ weit voneinander entfernt (weiter als die Auflösung) liegen und die verbleibenden Dispersionseffekte klein sind, ist folgende Näherung gerechtfertigt:

$$|\mathfrak{r}_W(\zeta)| = \left| \frac{1}{2\pi} \mathfrak{W}(\zeta) * \mathfrak{r}(\zeta) \right| \approx \frac{1}{2\pi} |\mathfrak{W}(\zeta)| * |\mathfrak{r}(\zeta)|. \quad (6.9)$$

Da die reelle nichtnegative Funktion $|\mathfrak{W}(\zeta)|$ durch die Wahl des Fensters bekannt ist, kann der Betrag der Probenantwort-Funktion $|\mathfrak{r}(\zeta)|$ durch eine (reelle) Entfaltung berechnet werden. Dazu wurde der in der Mikroskopie weit verbreitete und bewährte Lucy-Richardson-Entfaltungsalgorithmus (LR) [121, 122] mit dem Entfaltungskern $|\mathfrak{W}(\zeta)|$, der in Abbildung 6.6e gezeigt ist, verwendet. Das Ergebnis der Entfaltung nach 30 Iterationen ist in Abbildung 6.6f dargestellt. Die Position der einzelnen Grenzschichten wurde sehr genau rekonstruiert. Die Auflösung (Breite der Maxima) wird durch die Entfaltung jedoch nur scheinbar verbessert. Die Erklärung dafür ist selbstverständlich komplett analog zur etablierten Mikroskopie. Ist vorher bekannt, dass ein durch eine Verbreiterungsfunktion („Point-Spread-Funktion“) ausgewaschenes Signal nur von einem einzelnen räumlich lokalisierten (punktförmigen) Emitter stammt, übertrifft die Genauigkeit der Positionsbestimmung dieses Emitters, die beispielsweise über das Finden des Maximums oder eben die LR-Entfaltung geschehen kann, die Auflösung natürlich bei weitem. In diesem Fall gilt also die Näherung in Gleichung 6.9. Auf diesem Prinzip basieren die modernen ultrahochauflösenden Mikroskopiemethoden wie beispielsweise STED [50] oder PALM [52], bei denen dafür gesorgt wird, dass die räumliche Ausdehnung mehrerer abstrahlender punktförmiger Emittensembles wesentlich kleiner ist, als die Auflösung der detektierenden Optik (STED) bzw. sichergestellt wird, dass nie mehr als ein punktförmiger Emitter innerhalb der Auflösung gleichzeitig abstrahlt (PALM). Sind zwei Emitter bzw. im Falle von XCT zwei Grenzflächen aber näher zusammen als die Auflösung, gilt die Näherung

6.9 nicht mehr und die LR-Entfaltung ist dann auch nicht mehr in der Lage, die Position der Emitter zu trennen. Sie dient im Falle von XCT, wo nicht sichergestellt ist, dass die Grenzflächen isoliert sind (die Signale der Goldschichten sind bereits zwei um 2 nm getrennte Grenzflächen), einzig und allein der besseren Darstellung der Schichtposition und wird insbesondere zur übersichtlicheren Darstellung von dreidimensionalen Tomogrammen in diesem Kapitel verwendet. Zur Vermeidung von Missverständnissen wird in dieser Arbeit nur von Auflösung gesprochen, wenn der Abstand gemeint ist, an dem zwei Emitter (Grenzflächen) noch getrennt voneinander dargestellt werden können. Die Güte der Positionsbestimmung eines isolierten Emitters (Grenzfläche) wird hingegen als Genauigkeit bezeichnet.

An dieser Stelle wird darauf hingewiesen, dass Phasenrekonstruktionsalgorithmen, auch für den eindimensionalen Fall, existieren, welche die Dünnbesetztheit (auch „Sparsity-Constraint“ genannt) des zu rekonstruierenden Signals voraussetzen und so zur Konvergenz gebracht werden [123]. Es können dabei aber nur Signale rekonstruiert werden, die nur an wenigen Stellen ungleich null sind, von denen also vorher bekannt ist, dass sie nur wenige punkartige Emitter besitzen. Es wird deshalb nochmal explizit darauf hingewiesen, dass der hier entwickelte PR-XCT-Algorithmus ohne jegliche Vorkenntnisse über die Probe, zu denen auch die Dünnbesetztheit gehört, arbeitet. Das hier gezeigte Beispiel wurde mit simulierten, rauschfreien Daten rekonstruiert. Der praktische Nutzen von Phasenrekonstruktionsalgorithmen hängt jedoch davon ab, wie stabil sie unter dem Einfluss von messungsbedingtem Rauschen konvergieren. Im folgenden Kapitel wird der entwickelte PR-XCT-Algorithmus auf reale Messdaten angewendet.

6.2 PR-XCT mit gemessenen Daten

Die ersten Versuche, mit dem PR-XCT-Algorithmus das Artefakt aus dem am Synchrotron gemessenen dreidimensionalen Tomogramm (siehe auch Abb. 4.3) zu entfernen, waren nicht erfolgreich, wie in Abbildung B.2 im Anhang deutlich wird. Das Artefakt ist im PR-XCT-Signal immer noch vorhanden und wurde nicht bzw. nur sehr wenig abgeschwächt. Nachdem Fehler im Algorithmus durch die Rekonstruktion weiterer simulierter Daten ausgeschlossen werden konnten, wurde nach systematischen Fehlern in den Messdaten gesucht.

Das XCT-Signal selbst ist, wie bereits mehrfach beschrieben, eine Autokorrelation. Damit bestehen zwischen den einzelnen zur Tiefenstruktur gehörenden Maxima und den entsprechenden Autokorrelationsartefakten charakteristische Korrelationen. Beim nochmaligen Blick auf das XCT-Signal in Gleichung 4.26 wird das auch deutlich. Die tatsächliche Höhe der Peaks im Signal hängt immer von einem Produkt zweier komplexer Schichtreflektivitäten ($r_j(\kappa_D)$ und $r_l(\kappa_D)$) ab und somit sind die Maximalwerte der Peaks

miteinander korreliert. Wird diese Korrelation der Maxima im Signal durch die Messung gestört bzw. beeinflusst, indem beispielsweise Maxima in Abhängigkeit der Tiefe zusätzlich abgeschwächt werden, ist eine Rekonstruktion der realen Struktur ausgeschlossen, da das XCT-Signal dann eben keine reine Autokorrelation mehr ist. Tatsächlich tritt der Effekt der mit zunehmender Tiefe zunehmenden Abschwächung der Maxima im XCT-Signal beim Einsatz von realen, also in ihrer spektralen Auflösung begrenzten Spektrometern immer auf. Tiefere Strukturen bewirken höhere Modulationsfrequenzen in der Reflektivität, deren Amplituden bedingt durch die begrenzte Spektrometerauflösung durch die Messung mit zunehmender Frequenz abgesenkt werden. Bevor also eine Rekonstruktion mit dem PR-XCT-Algorithmus erfolgversprechend sein kann, muss der Einfluss dieses Effekts entweder durch den Einsatz sehr hochauflösender Spektrometer oder durch eine zusätzliche Entfaltung der gemessenen Reflektivitäten von der spektralen „Point-Spread-Function“ (PSF) des Spektrometers minimiert werden. Beide Ansätze wurden verfolgt. Da ein geeignetes XUV-Spektrometer erst entwickelt werden musste (siehe Kapitel 7.2), wird im Folgenden zunächst auf die algorithmische Lösung des Problems durch Entfaltung eingegangen, da viele Datensätze mit dem bereits am Synchrotron eingesetzten, in seiner Auflösung begrenzten Transmissions-Gitter-Spektrometer [111, 112] aufgenommen wurden.

6.2.1 Entfaltung der spektralen PSF des Spektrometers

Die spektrale PSF des eingesetzten Spektrometers ist keine konstante Größe, die kalibriert werden könnte. Da es sich bei dem Transmissions-Gitter-Spektrometer um ein abbildendes System handelt, hängt die spektrale Auflösung einerseits von der Größe der beobachteten XUV-Quelle (Reflexionspunkt auf Probe) als auch von der Justage des abbildenden toroidalen Spiegels ab. Außerdem benötigt das Liniengitter eine Trägerstruktur, die ihrerseits unerwünschte Beugungseffekte verursacht und so die PSF beeinflusst. Höhere Gitterordnungen können je nach Bandbreite zusätzlich die spektrale Auflösung verschlechtern. Aufgrund der Vielzahl der Effekte und in Ermangelung geeigneter definiert monochromatischer Strahlungsquellen³⁷ wurde kein Versuch unternommen, die spektrale PSF direkt zu messen. Stattdessen wurde der neu entwickelte PR-XCT-Algorithmus verwendet, um eine geeignete PSF zu finden. Dazu wurden viele verschiedene hypothetische „Point-Spread“-Funktionen (PSFen) verschiedener Breiten und Verläufe angenommen und die gemessenen Spektren entsprechend entfaltet. Danach wurde eine Rekonstruktion mit dem PR-XCT-Algorithmus versucht. Die Rekonstruktion wurde an allen Messpunkten im 3D-Volumen unabhängig voneinander durchgeführt. Somit können statistische „Zufallstreffer“ ausgeschlossen werden. Über die Qualität der Rekonstruktion des 3D-Volumens, hauptsächlich hinsichtlich der Unterdrückung der Artefakte kann über die Güte der PSF

³⁷Eine synchrotronartige, definiert monochromatische insitu-Quelle wäre von Nöten, um die tatsächlich im Experiment vorhandene PSF zu messen. Die Harmonischen selbst sind spektral bereits zu breit.

entschieden werden. Das mit Abstand beste Rekonstruktions-Ergebnis für die am Synchrotron aufgenommenen Daten wurde mit einer im Photonenenergieraum (ω) definierten Lorentz-artigen PSF der Breite $\Delta_{\text{PSF}} = 0,82 \text{ eV}$ (FWHM) erreicht:

$$\text{PSF}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Delta_{\text{PSF}}}{\omega^2 + \left(\frac{1}{2}\Delta_{\text{PSF}}\right)^2}. \quad (6.10)$$

In Anbetracht des ausgedehnten Quellpunktes am Synchrotron von ca. $300 \mu\text{m}$ und der damit bereits erwarteten schlechten spektralen Auflösung ist dies ein durchaus realistischer Wert. Für die Entfaltung des aufgenommenen Spektrums von der PSF wurden verschiedene Methoden wie z.B. die bereits beschriebene Lucy-Richardson-Entfaltung probiert. Aber auch hier führte eine speziell für das Problem angepasste Methode zum besten Rekonstruktionsergebnis. Dazu wird zuerst die Fourier-Transformation der Reflektivität (das ursprüngliche XCT-Signal) durch die Fourier-Transformation der PSF - im Falle der Lorentzkurve also eine Exponentialfunktion - geteilt. Dies verstärkt die durch das Spektrometer abgesenkten Peaks bei höheren Tiefen wieder. Da dies das Rauschen bei großen Tiefen und somit hohen Frequenzen in der Reflektivität extrem verstärkt, wird die Entfaltung kurz hinter der tiefsten Struktur abgebrochen (die Exponentialfunktion gleich 1 gesetzt). Dieses Abschneiden führt aber wiederum dazu, dass die Rücktransformation, also das entfaltete Spektrum, nicht mehr zwingend positiv und damit eigentlich keine Reflektivität mehr darstellt. Deswegen werden die Phasen des XCT-Signals mit einem weiteren Phasenrekonstruktionsalgorithmus, der auf dem bereits beschriebenen basiert, aber wesentlich einfacher aufgebaut ist, derart optimiert, dass das entfaltete Spektrum rein positiv und reell und damit die gesuchte entfaltete Lösung für die Reflektivität wird. In Abbildung 6.7 ist das aufgenommene sowie das entfaltete Spektrum eines lateralen Punktes des am Synchrotron aufgenommenen Tomogramms (siehe Abb. 4.3) gezeigt. Trotz

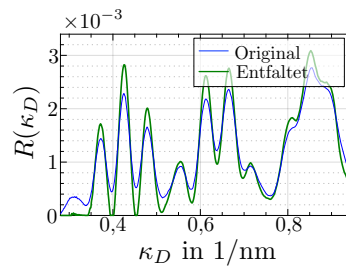


Abbildung 6.7: Entfaltung der gemessenen Reflektivität mit der PSF des Spektrometers: Die gemessene Reflektivität (blau) eines lateralen Punktes (A-Scan) des am Synchrotron aufgenommenen Tomogramms (siehe Abb. 4.3) wurde mit einer lorentz-förmigen PSF mit einer Breite von $\Delta_{\text{PSF}} = 0,82 \text{ eV}$ (FWHM) entfaltet (grün). Der Modulationskontrast wurde dadurch leicht erhöht.

der schlechten Spektrometerauflösung, unterscheiden sich die beiden Kurven nur leicht voneinander. Die Modulationstiefen sind leicht erhöht. Die kleine Änderung hat jedoch

einen großen Effekt auf die Rekonstruktion.

6.2.2 Eindeutige Rekonstruktion

Abbildung 6.8 zeigt das Ergebnis des PR-XCT-Algorithmus, nachdem die spektrale PSF des Spektrometers aus den gemessenen Reflektivitäten entfaltet wurde. Das bereits gezeigte ursprüngliche XCT-Signal ist für eine bessere Übersichtlichkeit noch einmal dargestellt (Abb. 6.8a). Für das PR-XCT-Tomogramm auf der rechten Seite der Abbildung wurde

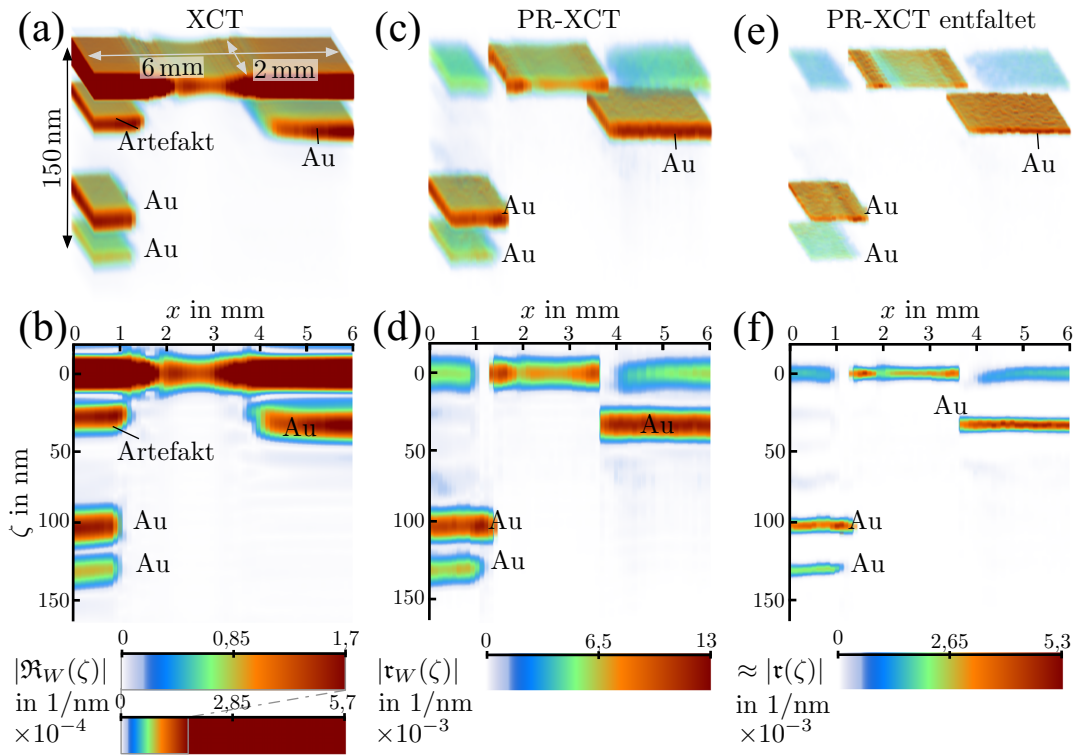


Abbildung 6.8: Dreidimensionale PR-XCT-Rekonstruktion von synchrotronbasierten Daten: Die Reflektivität aller lateralen Punkte ($61 \times 21 = 1281$) des am Synchrotron bei Photonenenergien von 35 eV – 98 eV aufgenommenen Tomogramms (siehe Abb. 4.3) wurden mit einer Spektrometer-PSF ($\Delta_{\text{PSF}} = 0,82$ eV) entfaltet. (a) (Schrägsicht) und (b) (gewichtete Projektion) zeigen das ursprüngliche XCT-Signal mit den intrinsischen Artefakten. Der PR-XCT-Algorithmus wurde unabhängig auf jeden lateralen Punkt angewendet (Schritt 1: 8×300 Iter. mit HIO $\nu = 0,5$, Schritt 2: 100 Iter., Schritt 3: 1×500 Iter. mit GS, $\zeta_{\text{max}} - \zeta_{\text{min}} = 180$ nm). Das Rekonstruktionsergebnis ist in (c) bzw. (d) dargestellt. In (e) bzw. (f) wurde die Fenster-Response mit LR-Algorithmus (10 Iter.) entfaltet. Die Oberfläche wurde für die Darstellung punktwise manuell auf $\zeta = 0$ nm gelegt. Die Artefakte sind beinahe komplett beseitigt. Die axiale Auflösung beträgt 17 nm.

die axiale (bzw. spektrale) Phase eines jeden der 1281 lateralen Messpunkte unabhängig voneinander rekonstruiert. Ein Signal ungleich 0 wurde nur im Bereich der Breite von $\zeta_{\text{max}} - \zeta_{\text{min}} = 180$ nm (etwas mehr als die halbe Breite des ursprünglichen XCT-Signals) zugelassen. Die anderen Parameter des PR-Algorithmus sind in der Bildunterschrift angegeben. Das Artefakt wird durch den Algorithmus beinahe komplett beseitigt. Die reale Probenstruktur konnte also, bis auf Verschiebung und Spiegelung, eindeutig an

jedem Punkt unabhängig rekonstruiert werden. Die Tiefen-Rekonstruktionen an den lateralen Punkten wurden für die Darstellung punktweise geschoben und entspiegelt, da eine zusätzliche zufällige lineare Phase bzw. eine komplex konjugierte Phase gleichwertige Ergebnisse liefern. Diese mathematisch triviale Mehrdeutigkeit bei der Rekonstruktion lässt sich in keinem Fall vermeiden. Die als Oberfläche identifizierte Schicht wurde immer auf eine Tiefe von 0 nm gelegt, da nur relative Tiefen gemessen werden können und eine absolute Rekonstruktion mit Oberflächentopographie nicht möglich ist. Tatsächlich ist an den Übergängen der beschichteten Bereiche auf der Probe zum reinen Silizium, welches zwischen beiden Schichtsystem liegt (siehe auch Abb. 4.3a), die Oberfläche derart beschädigt, dass kein Signal an dieser Stelle reflektiert wird. Die Ausrichtung der Struktur erfolgte in diesen Fällen anhand der anderen Schichten. Erst durch die Rekonstruktion wird sichtbar, dass die Reflektivität der Oberfläche geringer ist als die der vergrabenen Goldschichten. Somit bestätigt PR-XCT die bereits zuvor beschriebene Beobachtung im XCT-Signal, dass die Abschwächung des Artefaktes durch die nicht ausreichend reflektierende Oberfläche geringer ist als erwartet. Der Grund dafür ist die bereits beschriebene Degradierung von dünnen Goldschichten auf Silizium, insbesondere wenn sie der Atmosphäre direkt ausgesetzt sind. Die Abbildungen 6.8e und f zeigen das vom spektralen Fenster entfaltete PR-XCT-Signal mit der in Kapitel 6.1.1 beschriebenen scheinbar erhöhten Auflösung. Diese Entfaltung ist zusätzlich und unabhängig von der Entfaltung der spektralen PSF des Spektrometers.

Letztere wurde, wie bereits beschrieben, im Photonenenergieraum durchgeführt. Die spektrale PSF wird also als nicht energieabhängig angenommen. Intuitiv zu erwarten wäre allerdings eine PSF die aufgrund der Dispersion des Gitter eher wellenlängenunabhängig ist. Es wurden umfangreiche Untersuchungen durchgeführt, in denen sowohl wellenlängenunabhängige PSFen mit mehreren Entfaltungsmethoden als auch die direkte Lucy-Richardson-Entfaltung im Rohdatenbild der CCD auf ihre Eignung geprüft wurden. Die gezeigte Entfaltung im Photonenenergieraum brachte mit Abstand das beste Resultat und es kann deshalb davon ausgegangen werden, dass diese PSF, obwohl sie nicht intuitiv ist, der tatsächlichen am nächsten kommt.

Auch die laserbasierte dreidimensionale XCT-Messung (siehe auch Abb. 5.4) konnte dank der Entfaltung der PSF eindeutig rekonstruiert werden. Das Ergebnis ist im Anhang gezeigt (siehe Abb. B.3). Weil der XUV-Fokus bei der laserbasierten Messung kleiner war als am Synchrotron, war auch die spektrale Auflösung des Spektrometers besser. So war die Entfaltung einer Lorentz-PSF mit einer Breite von 0,41 eV bereits ausreichend für die Konvergenz.

6.2.3 Vergleich von PR-XCT mit verschiedenen XUV-Quellen

Die beiden Proben ohne Deckschicht, welche sowohl mit synchrotron- als auch mit laserbasierter Quelle an einem Punkt (A-Scans) untersucht wurden (siehe auch Abb. 5.6), konnten ebenfalls, nachdem die jeweiligen PSFen (Gl. 6.10 mit $\Delta_{\text{PSF}} = 0,82 \text{ eV}$ für die synchrotronbasierte und $\Delta_{\text{PSF}} = 0,41 \text{ eV}$ für die laserbasierte Messung) entfaltet waren, mit dem PR-XCT-Algorithmus rekonstruiert werden. Die rekonstruierten Strukturen sind in Abbildung 6.9 gezeigt. Für beide Quellen wird das Artefakt bei der Probe mit zwei

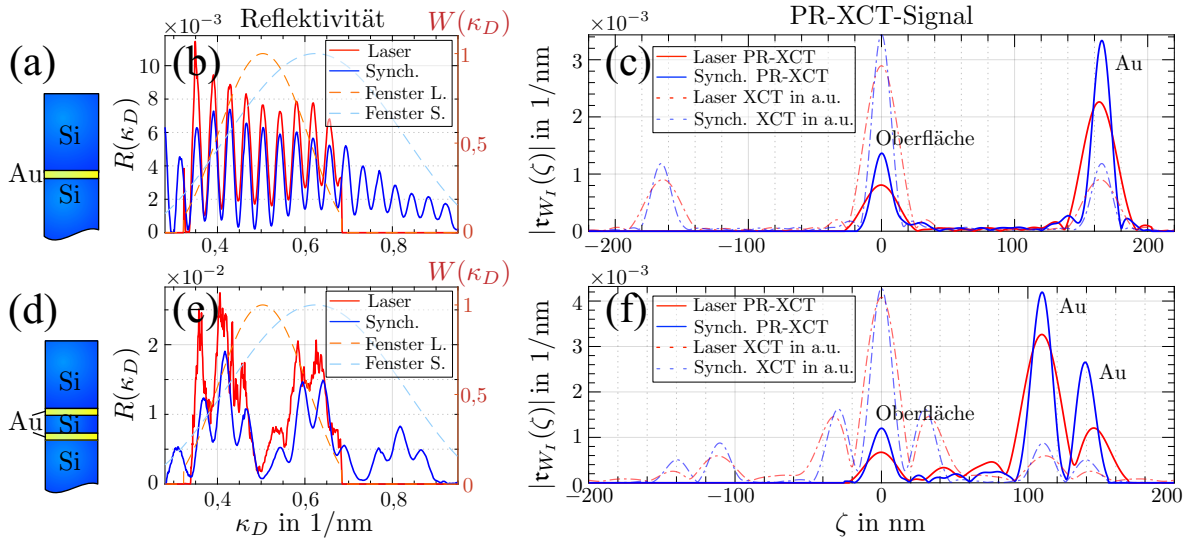


Abbildung 6.9: Vergleich des PR-XCT-Algorithmus mit synchrotronbasierten und laserbasierten Messungen: (b) zeigt die mit laser- und synchrotronbasierter Quelle gemessene Reflektivität (blau) der Probe (a), während (e) die gemessenen Reflektivitäten (blau) der Probe (d) darstellt (siehe auch Abb. 5.6). Die Reflektivitäten wurden zusätzlich mit der PSF des Spektrometers (Laser: $\Delta_{\text{PSF}} = 0,41 \text{ eV}$, Synchrotron: $\Delta_{\text{PSF}} = 0,82 \text{ eV}$) entfaltet. Die laserbasierten Messungen wurden im Fenster von 37 eV – 72 eV und die synchrotronbasierten Messungen zwischen 32 eV – 99 eV aufgenommen und jeweils mit einem Fenster ($\beta = 4$) gewichtet. (c) und (f) zeigen die zugehörigen PR-XCT-Rekonstruktionen gewichtet mit dem Integral der Fourier-Transformation der Fensterfunktion. Die axialen Auflösungen sind 29 nm im Falle der laserbasierten und 15 nm im Falle der synchrotronbasierten Messung. Synchrotron- und laserbasierte Messungen stimmen im Wesentlichen überein und sind beide artefaktfrei rekonstruierbar.

Goldschichten erfolgreich unterdrückt. Analog zum XCT-Signal wurde das PR-XCT-Signal wieder mit dem Integral über die Fensterfunktion gewichtet, damit die Vergleichbarkeit erhalten bleibt (siehe auch Gl. 5.1). Zusätzlich zum PR-XCT-Signal wurde auch das ursprüngliche XCT-Signal eingezeichnet. Die Strukturen werden in allen Fällen richtig rekonstruiert. Durch die Degradierungseffekte während der Lagerung der Proben und die bereits angesprochenen Messfehler in Einfallswinkel und der Spektrometerkalibrierung kommt es zu leichten Abweichungen in der Position der Schichten. Die Amplituden der laserbasierten Messungen sind zwar geringer, jedoch ist das Integral über die Peaks aufgrund ihrer größeren Breite (durch Aluminium begrenztes spektrales Fenster) jetzt näherungsweise gleich zu den Synchrotrondaten. Dies wird auch in den entfalteten Reflektivitäten

(Abb. 6.9b und e) deutlich. Die Modulationstiefen stimmen nun besser überein. Die in Kapitel 5.2 beschriebene Abweichung der nicht entfalteten Reflektivitäten in Abbildung 5.6 waren also hauptsächlich eine Folge der unterschiedlichen spektralen PSFen der beiden Messungen.

Die erfolgreichen Rekonstruktionen zeigen, dass der PR-XCT-Algorithmus tatsächlich auch mit gemessenen Daten zuverlässig für jeden Punkt unabhängig zur richtigen Lösung konvergiert, wenn die Spektrometerfunktion entfaltet wird. Das Problem der Mehrdeutigkeit von XCT ist damit bis auf die triviale nicht zu vermeidende Spiegel- und Translationsinvarianz gelöst³⁸.

6.3 Laserbasierte PR-XCT an lateral strukturierter Probe

Für einen Test der Leistungsfähigkeit von XCT wurde die in Abbildung 6.10 dargestellte Probe untersucht. Sie enthält laterale Strukturen bestehend aus dünnen strukturierten

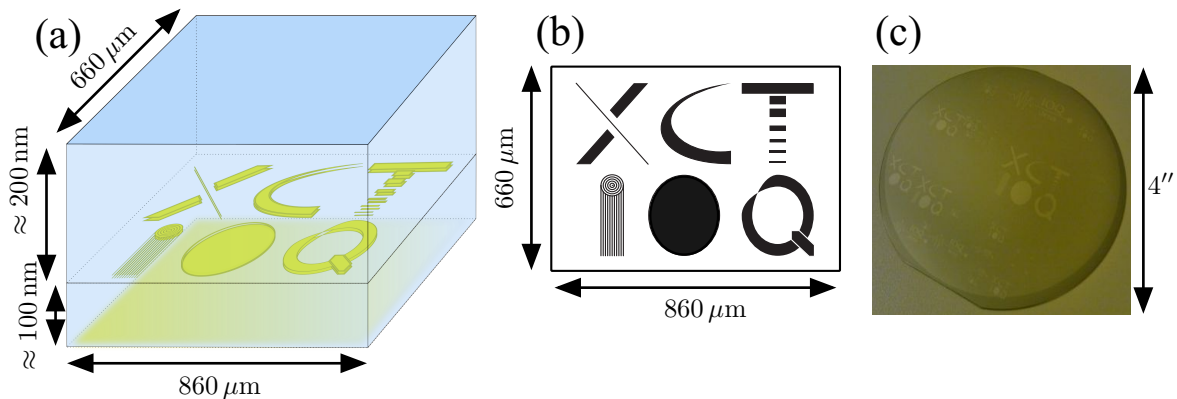


Abbildung 6.10: Dreidimensional strukturierte siliziumbasierte Probe: Die in (a) schematisch gezeigte Probe wurde am Leibniz-Institut für Photonische Technologien im Elektronenstrahlolithographie-Verfahren hergestellt. Sie befindet sich neben anderen Strukturen auf einem 4" Si-Wafer. Die untere Schicht der Probe enthält eine großflächige Fotografie. Darauf wurde Silizium abgeschieden und schließlich die in (b) gezeigte Struktur als dünne Goldschicht geschrieben. Letztlich wurde der gesamte Wafer mit ca. 200 nm Silizium bedeckt. (c) zeigt den Wafer vor dem Aufbringen der Siliziumdeckschicht. Nach der Beschichtung ist die Struktur nicht mehr zu erkennen.

Goldschichten in verschiedenen Ebenen eingebettet in Silizium. Die Probe wurde am Leibniz-Institut für Photonische Technologien im Elektronenstrahlolithographie-Verfahren hergestellt. Die unterste Ebene enthält eine großflächige Fotografie, die nicht gezeigt

³⁸ Alle bisher vermessenen Proben konnten zuverlässig rekonstruiert werden. Es ist allerdings nicht auszuschließen, dass bei sehr komplizierten Probenstrukturen das Rauschen einen größeren Einfluss hat und eine Konvergenz zur richtigen Lösung eventuell nicht mehr möglich ist. Unter anderem deswegen wurde auch nach Entwicklung des PR-XCT-Algorithmus weiter an der technischen Umsetzung des Membran-Konzeptes als XUV-Interferometer gearbeitet (siehe Kapitel 8).

ist. In der darüber liegenden Ebene wurden auf dem 4" großen Träger-Wafer Schriftzüge (unten links in der Abbildung) in verschiedenen Größen aufgebracht, welche als laterale Auflösungstests ausgelegt wurden. Der rechte Teil der Abbildung zeigt eine Fotografie des beschichteten Wafers vor dem Aufbringen der finalen Silizium-Deckschicht. Eine etwa $950\ \mu\text{m} \times 420\ \mu\text{m}$ große Fläche, welche einen der erwähnten Schriftzüge „XCT“ enthält, wurde mit einer Scanauflösung von $15\ \mu\text{m} \times 15\ \mu\text{m}$ an insgesamt 1792 Punkten mit dem bereits beschriebenen laserbasierten XCT-Aufbau tomographiert [124] und mit dem PR-XCT-Algorithmus rekonstruiert [6]. Das XCT- sowie das PR-XCT-Signal sind in Abbildung 6.11 dargestellt. Die dreidimensionale Struktur der Probe konnte zerstörungsfrei mit einer

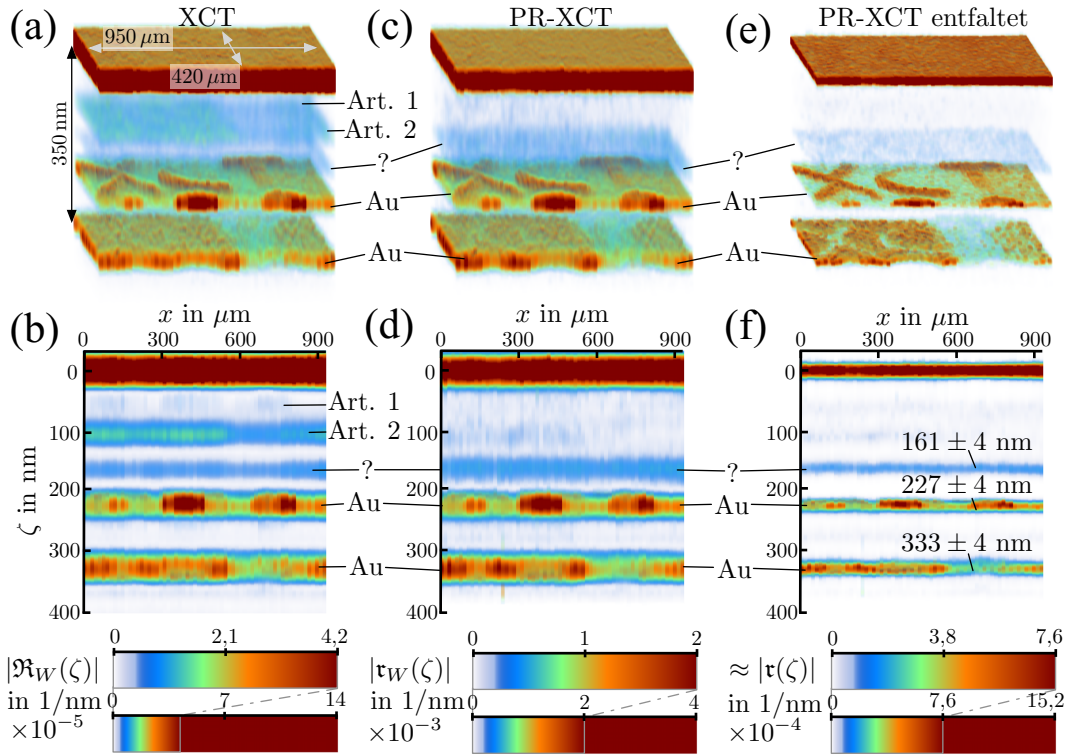


Abbildung 6.11: Laserbasierte dreidimensionale PR-XCT: Die in Abb. 6.10 dargestellte Probe wurde mit laserbasierter XCT im Spektralbereich von 33 eV – 71 eV (Kaiser-Bessel-Fenster mit $\beta = 8$) auf $64 \times 28 = 1792$ Punkten abgerastert. Die Rastergröße beträgt $15\ \mu\text{m} \times 15\ \mu\text{m}$. Die tatsächliche laterale Auflösung ist durch die Fokusgröße auf etwa $23\ \mu\text{m}$ begrenzt. Die gesamte Messdauer betrug 388 Minuten (13 s pro Punkt (A-Scan) davon 5 s Belichtungszeit mit automatischem Wellenlängenscan). Das resultierende XCT-Signal ist in (a) (Schrägsicht) bzw. (b) (gewichtete Projektion) dargestellt. Die Struktur wurde rekonstruiert, aber es treten weitere Schichten oberhalb von 200 nm auf. Die gemessenen Reflektivitäten der einzelnen lateralen Punkte wurden mit der PSF des Spektrometers ($\Delta_{\text{PSF}} = 0,41\ \text{eV}$) entfaltet und die Proben-Response mit dem PR-XCT-Algorithmus (Schritt 1: 5×400 Iter. mit HIO $\nu = 0,5$, Schritt 2: 100 Iter., Schritt 3: 1×500 Iter. mit GS, $\zeta_{\text{max}} - \zeta_{\text{min}} = 420\ \text{nm}$) an jedem Punkt unabhängig voneinander rekonstruiert. Das Ergebnis ist in (c) bzw. (d) gezeigt. Die Artefakte konnten beseitigt werden. Eine nicht erwartete Schicht „?“ ist in der Probe enthalten. (e) bzw. (f) zeigt das mit Hilfe des LR-Algorithmus (10 Iter.) entfaltete PR-XCT-Signal mit den bestimmten Schichttiefen. Die axiale Auflösung der Messung beträgt 35 nm.

axialen Auflösung von $\approx 35\ \text{nm}$ abgebildet werden. Im Vergleich zur ersten laserbasierten XCT-Messung (siehe Kap. 5.2) konnte die Messdauer erheblich verkürzt werden. Durch

automatisierte und mit der CCD-Kamera synchronisierte Wellenlängenscans des OPA war eine Belichtungszeit von 5 s pro lateralem Punkt (A-Scan) ausreichend. Das Auslesen sowie Fahren der Probe nahmen noch einmal 8 s in Anspruch, sodass die gesamte Messung der 1792 Punkte 388 Minuten dauerte. Zusätzlich zu den Signalen der beiden Goldschichten (bei 227 nm und 333 nm) erscheinen im XCT-Signal (Abb. 6.11a bzw. b) drei weitere Schichten. Aufgrund der Autokorrelationsartefakte im XCT-Signal wurde aber nur Artefakt 2 als Interferenz zwischen den beiden Goldschichten erwartet. Die anderen beiden Schichten (Art. 1 und der als „?“ bezeichneten) sollten eigentlich nicht vorhanden sein und deuten darauf hin, dass mindestens eine reale und ursprünglich nicht geplante Schicht in der Probe vorhanden sein muss. Eine eindeutige Identifizierung, welche der Signale real sind und welche nicht, ist ohne weiteres Wissen über die Probe nicht direkt möglich. Erst durch den Einsatz des PR-XCT-Algorithmus, welcher auch hier nach der Entfaltung der spektralen Auflösung mit $\Delta_{\text{PSF}} = 0,41 \text{ eV}$ in jedem Punkt unabhängig konvergierte, konnten die Artefakte beseitigt werden. So wird klar (siehe Abb. 6.11c bzw. d und die von dem spektralen Fenster entfaltete Darstellung e bzw. f), dass offenbar eine nicht geplante und somit unbekannte, lateral kaum strukturierte Schicht (als „?“ bezeichnet) bei einer Tiefe von 161 nm vorhanden sein muss. Um diesen Befund zu bestätigen, wurde die untersuchte Probe zunächst mit einem Rasterelektronenmikroskop (REM) untersucht. Dazu musste mit einem fokussierten Ionenstrahl (FIB) die Probe zunächst seitlich aufgeschnitten (und damit zerstört) werden, um die Tiefenstruktur mit dem REM abzubilden. Abbildung 6.12a zeigt das REM-Bild von der Seite in Falschfarbendarstellung. Man erkennt die Oberfläche (mit

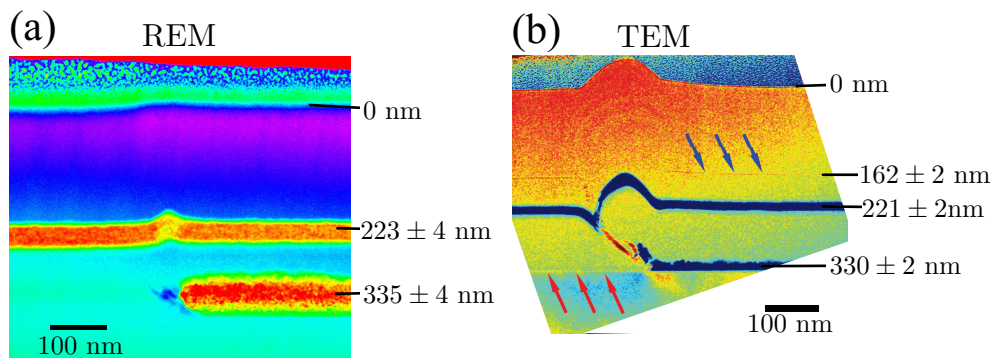


Abbildung 6.12: Raster- und Transmissionselektronenmikroskopaufnahme der XCT-Probe: (a) zeigt eine Rasterelektronenmikroskopaufnahme (REM) an einem Schnitt durch die vorher mit XCT untersuchte Probe (siehe Abb. 6.10 und 6.11). Dazu wurde mit einem fokussierten Ionenstrahl (FIB) eine wenige Nanometer dünne Lamelle aus der Probe herausgeschnitten. Die zwei vergrabenen Goldschichten sind zu erkennen. Die mit XCT gefundene dritte Schicht ist mit dem REM *nicht* detektierbar. Erst mit einem Transmissionselektronenmikroskop (TEM) (b) ist die 1-2 nm dicke Schicht gerade noch zu erkennen (blaue Pfeile). (Abbildung adaptiert aus [6])

einer für den FIB-Schnitt benötigten Platin-Schutzschicht) und die beiden vergrabenen und strukturierten Goldschichten. Es findet sich aber kein Hinweis auf eine zusätzliche Schicht in der Probe. Für eine noch genauere Untersuchung mit noch höherer Auflösung

wurde, ebenfalls mit einem fokussierten Ionenstrahl, eine wenige hundert Nanometer dünne Lamelle aus der Probe geschnitten. Die Lamelle wurde dann mit einem Transmissions-Elektronen-Mikroskop (TEM) untersucht. Erst in der gezeigten Falschfarbendarstellung wird tatsächlich eine sehr dünne ($1 - 2 \text{ nm}$) Schicht in exakt (1 nm Abweichung) der mit XCT gemessenen Tiefe schwach sichtbar. Die XCT-Messung wurde somit verifiziert. Die Existenz der Schicht war auch dem Hersteller zunächst nicht bekannt. Erst durch das Nachverfolgen der gesamten Herstellungskette wurde herausgefunden, dass während des finalen Beschichtungsvorganges der Siliziumdeckschicht eine Unterbrechung erfolgte. Vor dem weiteren Beschichten wurde die Probe erneut optisch inspiziert und somit kurzzeitig der Atomsphäre ausgesetzt. Folglich handelt es sich bei der Schicht um sehr dünnes Siliziumdioxid (SiO_2) [125]. Hier zeigt sich die Leistungsfähigkeit und der in Kapitel 2 beschriebene vorteilhafte Materialkontrast von XCT. Leichte Elemente wie Sauerstoff können mit dem Elektronenmikroskop nur schlecht von Silizium unterschieden werden, während durch die erhöhte Absorption im XUV der Kontrast bei XCT wesentlich größer ist. In der Halbleiterindustrie werden Oxidschichten als Passivierungsschichten eingesetzt und spielen somit eine wichtige Rolle für die Funktionalität. Es sei in diesem Zusammenhang auch noch einmal darauf hingewiesen, dass XCT die Struktur zerstörungsfrei abbilden konnte, während die Probe für die REM- bzw. TEM-Messung zerstört werden musste.

Die Genauigkeit der Tiefenmessung (absolute Werte) von XCT wurde mittels Größtfehlerabschätzung auf $\pm 4 \text{ nm}$ bestimmt. Dieser Fehler stammt hauptsächlich von der Messungenauigkeit des Einfallswinkels der XUV-Strahlung auf die Probe, welche ungefähr $\pm 0,5^\circ$ betrug und der Tatsache, dass der angegebene Wert bei XCT eine Mittelung über die gesamte strukturierte Schicht ist. Bei den Elektronenmikroskop-Messungen wurde dagegen nur ein kleiner lateraler Bereich der Probe untersucht und es werden zusätzlich auch Herstellungsungenauigkeiten an Randbereichen der Goldstrukturen sichtbar. Die mit TEM vermessenen Dicken der Goldschichten (obere: 16 nm , untere: 14 nm) liegt unterhalb der Auflösungsgrenze der XCT-Messung. Deshalb können Vorder- und Rückseite im XCT-Signal nicht voneinander unterschieden werden. Für den Vergleich der absoluten Tiefenwerte wurden diese bei XCT als Position der Maxima der Peaks und bei TEM als Mittelpunkte der Schichten bestimmt. Sämtliche Tiefenwerte stimmen innerhalb der Konfidenzintervalle der beiden Messungen überein.

Zur Bestimmung der lateralen Auflösung der gezeigten XCT-Messung wird die Schicht in einer Tiefe von 227 nm genauer betrachtet. Sie ist in Abbildung 6.13 (En-Face-Scan) gezeigt. Die laterale Auflösung wurde aus den Messdaten, wie in der Abbildung dargestellt, zu $\approx 23 \mu\text{m}$ bestimmt. Dieser Wert wurde auch durch eine zusätzliche direkte Vermessung der XUV-Fokusgröße mit Hilfe eines Ce:YAG Kristalls, welcher unter XUV-Strahlung fluoresziert (siehe Abb. B.4 im Anhang), in guter Übereinstimmung bestätigt. Der Fokus liegt dabei knapp oberhalb der Beugungsbegrenzung und ist damit hauptsächlich durch

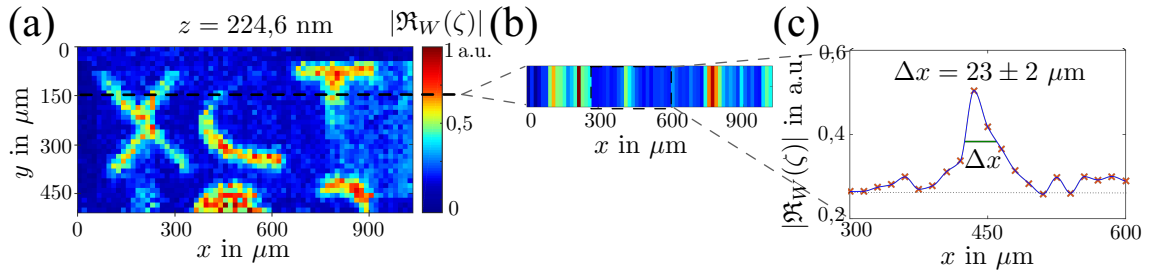


Abbildung 6.13: Bestimmung der lateralen Auflösung der laserbasierten XCT-Messung: (a) zeigt einen Schnitt (En-Face-Scan) durch das 3D-XCT-Tomogramm (siehe Abb. 6.11) in einer Tiefe von $\approx 224,6$ nm. (b) zeigt eine einzelne Zeile aus dem Raster-Scan und (c) stellt die Amplituden in dieser Zeile graphisch dar. Die laterale Auflösung beträgt etwa $23 \mu\text{m}$ (FWHM). Die laterale Auflösung ist durch die XUV-Fokusgröße vorgegeben (siehe auch Anhang Abb. B.4).

die gewählte Fokussiergeometrie und nicht aufgrund von Wellenfrontfehlern der Quelle beschränkt. Wie in Kapitel 4 beschrieben, ist die bisherige Realisierung von XCT auf kleine NA beschränkt, da die Kosten für breitbandige Optiken mit hoher NA enorm hoch sind. Für die gezeigten XCT-Messungen ist die laterale Auflösung deshalb mehrere Größenordnungen unterhalb der axialen Auflösung. Ansätze zur Verbesserung der lateralen Auflösung und somit der Erweiterung der potentiellen Anwendungsgebiete von XCT zu in allen drei Dimensionen nanostrukturierten Proben werden im Ausblick (siehe Kapitel 8) erläutert. Im Vergleich zur Synchrotronmessung (siehe Kapitel 4.5) ist die laterale Auflösung bei der hier gezeigten laserbasierten XCT bereits dennoch um eine Größenordnung verbessert worden.

6.4 Zusammenfassung Phasenrekonstruktion

Zusammenfassend für dieses Kapitel beseitigt der Algorithmus die durch den einfachen Common-Path-Versuchsaufbau auftretenden Mehrdeutigkeiten von XCT, indem aus der Autokorrelation die tatsächliche Probenstruktur inklusive Phaseninformation ohne weitere Vorkenntnisse³⁹ rekonstruiert wird. Erst durch die Kombination aus XCT-Verfahren und Algorithmus, welche PR-XCT genannt wird, ist das Verfahren in der Lage, beliebige vorher unbekannte Proben zu untersuchen. Dadurch wird das Anwendungspotential enorm erweitert. Da durch die Rekonstruktion nicht nur die dargestellte Struktur sondern auch die Phase bekannt ist, können in Zukunft neben der Struktur auch spektroskopische Informationen über die Materialien und deren Brechzahlen extrahiert werden (siehe Kap. 8.4).

³⁹Die Kenntnis der Dispersion des dominanten Materials ist hilfreich aber nicht notwendig.

7 Entwicklung und Aufbau eines laserbasierten XCT-Mikroskops

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein neuartiges und flexibel einsetzbares lasergetriebenes XUV-Mikroskop aufgebaut und sukzessiv verbessert. Die bisher gezeigten Messungen wurden in verschiedenen Aufbaustufen des Gesamtsystems aufgenommen. Dieses Kapitel beschreibt den aktuellen Stand des Mikroskops. Es wurde derart geplant und umgesetzt, dass zum einen die bekannten Nachteile der bis dahin eingesetzten Aufbauten ausgeglichen werden konnten und es zum anderen genug Flexibilität bietet, um weiterführende Aufbauten und Experimente zu ermöglichen. Neben der Entwicklung der Quelle [5] und des PR-XCT-Algorithmus [6] wurde auch ein leistungsstarkes, modulares XUV-Spektrometersystem konzipiert und realisiert [126], welches wesentliche Verbesserungen hinsichtlich der spektralen Auflösung und der Detektionseffizienz erzielt. Dem Aufbau wurde eine aktiv stabilisierte und in allen Achsen justierbare Membran in einem Abstand von wenigen 100 nm hinzugefügt, um interferometrische Messungen und damit direkte XCT ohne Autokorrelationsartefakte zukünftig zu ermöglichen.

7.1 XCT-Mikroskop

Das XCT-Mikroskop wurde ultrahochvakuum-tauglich (UHV) ($< 10^{-9}$ mbar) ausgelegt, um das Abscheiden von Kohlenstoff auf allen Oberflächen zu verhindern. Dabei wurde auf eine modulare Bauweise geachtet, um flexibel auf die Bedürfnisse der jeweiligen Aufgabenstellung reagieren zu können. Zusätzlich kann jedes Modul (jede einzelne Vakuumkammer) differentiell gepumpt werden. Das fertiggestellte XCT-Mikroskop inklusive des neu entwickelten Spektrometers (siehe Kap. 7.2) ist in Abbildung 7.1 dargestellt. Die Laserstrahlung wird auf dem optischen Tisch unter Verwendung einer aktiven Strahlstabilisierung mit einer Linse ($f = 30$ cm) in die HHG-Kammer fokussiert. In der Antireflex-Einheit (AR-Einheit) wird mit Hilfe von zwei für infrarote Strahlung antireflex-beschichteten Spiegeln die XUV-Strahlung von der Laserstrahlung getrennt, indem das XUV Licht reflektiert und das Laserlicht transmittiert und geblockt wird. Die danach noch verbleibende Laserstrahlung wird mit einer dünnen Aluminiumfolie, welche in einem Vakuumventil sehr einfach in den Strahlengang bewegt werden kann, herausgefiltert. In der Fokus-Einheit befindet sich ein toroidaler Spiegel, der die Strahlung beugungsbegrenzt auf die Probe fokussiert. Für die Fokussierung der XUV-Strahlung wurde nach langer Evaluation der technischen Möglichkeiten ein torodischer Spiegel mit einer Brennweite von $f = 1$ m gewählt. Bei maximaler Ausleuchtung unterstützt er eine beugungsbegrenzte Auflösung von $\approx 10 \mu\text{m}$. Breitbandige Optiken, die noch kleinere Fokusgrößen und somit bessere laterale Auflösung

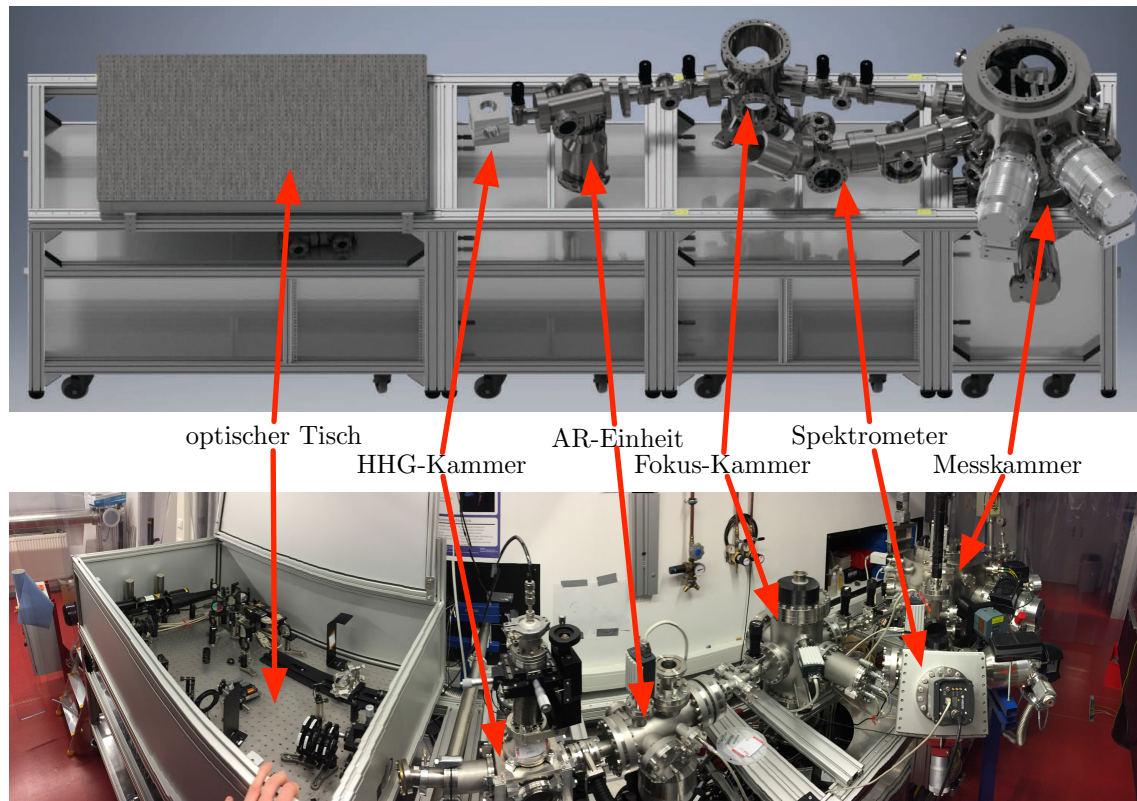


Abbildung 7.1: Skizze und Foto des fertiggestellten laserbasierten XCT-Mikroskops:

Die Laserstrahlung wird auf dem optischen Tisch unter Verwendung einer aktiven Strahlstabilisierung mit einer Linse in die HHG-Kammer fokussiert. In der Antireflex-Einheit wird mit Hilfe von zwei speziell antireflex-beschichteten Spiegeln die XUV-Strahlung von der Laserstrahlung getrennt. Noch verbliebene Laserstrahlung wird mit einer dünnen Aluminiumfolie herausgefiltert. In der Fokus-Einheit befindet sich ein toroidaler Spiegel ($f = 1\text{ m}$), der die Strahlung beugungsbegrenzt auf die Probe in der Messkammer fokussiert. Dort befindet sich der Probenstisch mit Raster Scanner und aktiver Stabilisierung des Winkels. Die reflektierte Strahlung wird mit einem neu entwickelten XUV-Spektrometer, bestehend aus einem Refokussierungszylinder und einem Reflexionsgitter detektiert. Der komplette Aufbau ist mehr als drei Meter lang und für Ultrahochvakuum geeignet. Die einzelnen Komponenten können differentiell gepumpt werden. Alle wesentlichen Justageachsen der Optiken und der Probe können motorisiert bzw. durch Piezoversteller im Vakuum eingestellt werden.

garantieren, wurden umfassend evaluiert. Jedoch waren die zu erwartenden Entwicklungs- und Herstellungskosten im Bereich von mehreren 100 TEuro (z.B. Off-Axis Ellipsoiden) deutlich zu hoch. Die speziellen Anforderungen an die Breitbandigkeit der Optiken sind dabei das hauptsächliche Problem. Obwohl das XCT-Mikroskop weiterhin nur eine geringe NA besitzt, wurde es derart flexibel geplant, dass alternative Ansätze zur Verbesserung der lateralen Auflösung getestet werden können (siehe Kapitel 8). Ein weiterer Vorteil der gewählten langbrennweitigen Fokussierung besteht darin, dass genügend Strecke für differentielle Pumpstufen und Halterungen für Filterfolien (zur Trennung von XUV- und Laserstrahlung) zur Verfügung steht. Außerdem garantiert die geringe Fokussierdivergenz eine vollständige Ausleuchtung der Diagnostik (siehe Kap. 7.2), sodass alle von der Probe reflektierte Strahlung auch im Detektor registriert werden kann und somit die Messdauer

minimiert wird.

In der eigentlichen Messkammer befindet sich der Probenstisch mit Rasterscanner. Die reflektierte Strahlung wird mit dem neu entwickelten XUV-Spektrometer bestehend aus einem Refokussierungszyylinder und einem Reflexionsgitter detektiert. Der komplette Aufbau ist mehr als drei Meter lang. Alle wesentlichen Justageachsen der Optiken und der Probe können motorisiert bzw. durch Piezoversteller im Vakuum eingestellt werden. Die Fokus- und die Messkammer sind zusätzlich schwingungsgedämpft gelagert, um die Kammern von der Umgebung zu entkoppeln. Der Probenstisch selbst besteht aus piezogetriebenen zweidimensionalen Rasteranschienen, die eine Probengröße von 10 cm unterstützen und auf Nanometer genau positionieren können. Außerdem wurde eine Halterung für eine wenige Nanometer dünne Membran hinzugefügt, die vor der Probe positioniert werden kann. Drei Piezomotoren werden dazu verwendet, den Winkel und den Abstand der Probe zum Membranhalter zu ändern. Die Position der drei Piezomotoren wird durch jeweils einen kapazitiven und einen optischen Sensor aktiv auf wenige Nanometer stabilisiert. Dies soll ein präzises Ausrichten der Probe zur Membran und damit in Zukunft eine interferometrische Messung ermöglichen (siehe auch Kapitel 8). Zusätzlich muss der gesamte Probenstisch so ausgerichtet sein, dass der einfallende XUV-Strahl in das XUV-Spektrometer geleitet wird. Dazu steht der Probenstisch auf einem vakuumtauglichen Hexapod, der wiederum in sechs Achsen bewegt werden kann. Somit können alle relevanten Achsen, die zur Justage benötigt werden, im Vakuumbetrieb während der Messung optimiert werden. Das gesamte aus elf Achsen bestehende und im Anhang in Abbildung B.5 dargestellte Halterungssystem für die Probe ist durch die Lagerung auf Federn mechanisch von der Messkammer entkoppelt.

7.2 Modulares XUV-Spektrometer

Eine schlechte spektrale Auflösung des Spektrometers führt zu einer Zerstörung der Korrelationen im XCT-Signal und die spektrale PSF des Spektrometers muss aufwendig rekonstruiert und herausgerechnet werden (siehe Kapitel 6.2.1). Unter anderem deshalb wurde von Martin Wünsche ein neuartiges, hochauflösendes und modulares XUV-Spektrometer entwickelt [126]. Bei der Entwicklung des Spektrometers wurde neben den Anforderungen der XCT auch darauf geachtet, dass es flexibel einsetzbar bleibt. Das modulare Design ermöglicht es, jedes Modul einzeln oder in beliebiger Kombination untereinander, je nach Anforderung, zu betreiben. Das Spektrometer ist im Anhang in Abb. B.6 gezeigt. Es besteht aus einem Fokussierungsmodul, welches einen zylindrischen Spiegel verwendet, um einfallendes Licht in der nicht-dispersiven Ebene zu fokussieren. Damit wird das Signal-zu-Rausch-Verhältnis auf dem Detektor (CCD) entscheidend erhöht. Das Filtermodul kann mit mehreren Filterfolien bestückt werden und erlaubt das schnelle Wechseln

von Filtern für die Trennung von XUV und restlicher Laserstrahlung. Das Gitter-Modul ist das dispersive Element des Spektrometers und kann ohne die anderen Module einzeln verwendet werden. Es enthält ein Reflexionsgitter mit variierendem Linienabstand („Variable-Line-Spacing“ VLS), dass die XUV-Strahlung in der dispersiven Ebene auf den Detektor fokussiert und spektral aufspaltet. Das Detektor-Modul erlaubt eine Justage des Winkels und des Abstands des Detektors zum Gitter, was essentiell für die Justage und den flexiblen Einsatz ist. Außerdem kann der Detektor in der dispersiven Ebene verfahren werden, um einen großen spektralen Bereich abzudecken. Alle wesentlichen Justage-Achsen des Spektrometers sind vakuumtauglich motorisiert. Außerdem können im laufenden Betrieb sowohl der Zylinderspiegel als auch das Gitter durch Planspiegel ersetzt werden, die es erlauben, entweder das Spektrum und die Divergenz der Strahlung in einer Richtung oder die komplette Divergenz der Strahlung zu messen. Die theoretische maximale Auflösung des Spektrometers ist im Anhang in Abb. B.7 gezeigt. Sie ist besser als die durch die Kamera-Pixelierung (Pixelgröße $13,5\,\mu\text{m}$) vorgegebene Auflösung.

Das neue Spektrometer übertrifft damit die Auflösung des bisher genutzten Transmissionsgitter-Spektrometers um den Faktor 4-6, was auch experimentell bestätigt wurde. Durch die erhöhte spektrale Auflösung kann der Effekt der spektralen PSF auf PR-XCT minimiert werden. Außerdem erlaubt eine hohe spektrale Auflösung auch eine erhöhte Eindringtiefe (hohe Modulationsfrequenzen) für XCT.

7.3 PR-XCT mit fertiggestelltem XCT-Mikroskop

Eine der ersten Messungen mit dem fertiggestellten XCT-Mikroskop (ohne die Membranfunktionalität) ist in Abbildung 7.2 dargestellt. Die untersuchte Probe wurde auf dem gleichen Trägerwafer hergestellt wie die Probe aus Kapitel 6.3 und enthält deshalb neben zwei lateral unterschiedlich strukturierten Goldschichten ebenfalls die durch XCT gefundene Oxidschicht. Alle drei Schichten werden mit einer axialen Auflösung von 38 nm korrekt abgebildet. Da die Probe eine Größe von $7,4\,\text{mm} \times 3,8\,\text{mm}$ besitzt, wurden eine Rastercangröße von $90\,\mu\text{m} \times 90\,\mu\text{m}$ gewählt, um die Anzahl der Messpunkte und die Messzeit auf realistische Werte zu begrenzen. Die laterale Auflösung ist bei dieser Messung demnach durch das Raster und nicht durch den XUV-Fokus begrenzt. Trotz der Kompromisse hinsichtlich der lateralen Auflösung besteht das Tomogramm aus der bisher größten Anzahl an Messpunkten, die ohne Unterbrechung und Rekalibrierung des Mikroskops aufgenommen werden konnten. Die Messdauer betrug dabei knapp 11 Stunden. Dies zeigt auch, dass die entwickelte und immer weiter verbesserte laserbasierte XUV-Quelle gut beherrscht ist und auch über lange Zeiten stabil gehalten werden kann. Die Messdauer pro Punkt konnte durch weitere Verbesserungen der Aufnahmeroutine auf ca. 11 s bei einer Belichtungszeit von 5 s pro Punkt reduziert werden. Aufgrund der Leistungsfähigkeit des

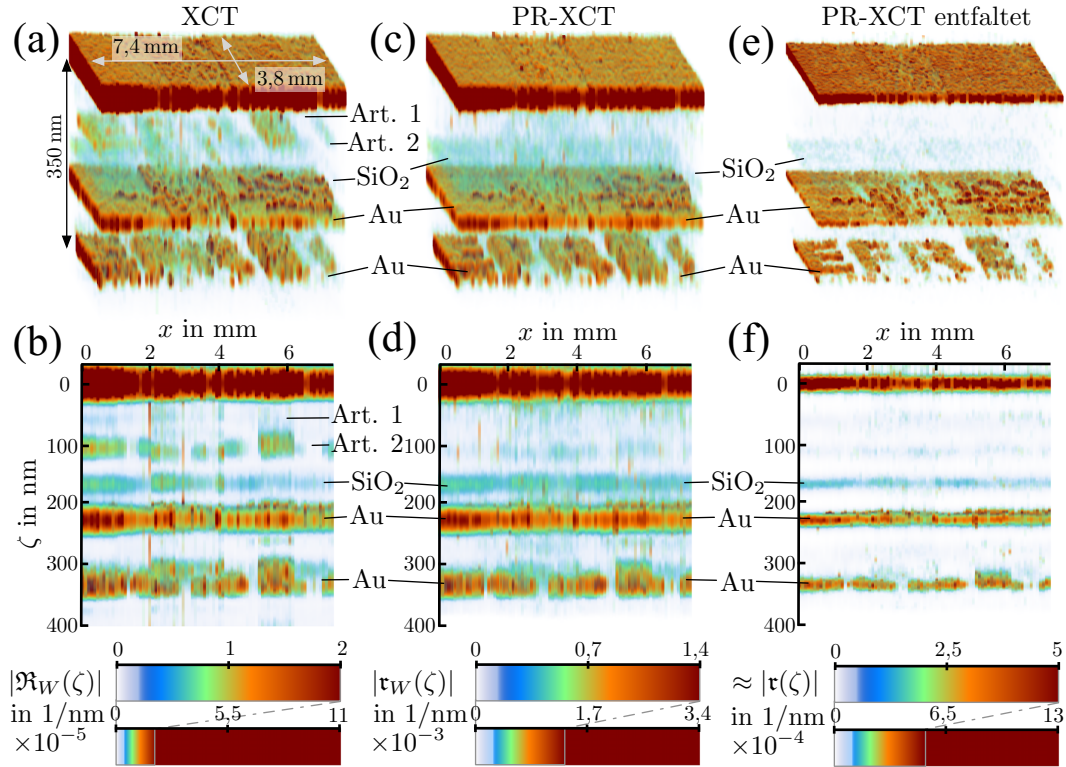


Abbildung 7.2: Laserbasierte dreidimensionale PR-XCT mit fertiggestelltem XCT-Mikroskop: Eine dreidimensional strukturierte siliziumbasierte Probe mit dünnen Goldstrukturen wurde mit dem fertiggestellten XCT-Mikroskop (siehe Abb. 7.1) im Spektralbereich von 41,3 eV – 72,5 eV (Kaiser-Bessel-Fenster mit $\beta = 6$) auf $83 \times 43 = 3569$ Punkten abgerastert. Die Rastergröße beträgt $90 \mu\text{m} \times 90 \mu\text{m}$. Die tatsächliche laterale Auflösung ist damit durch das Raster und nicht durch die Fokusgröße bestimmt. Die gesamte Messdauer betrug 654 Minuten (11 s pro Punkt (A-Scan) davon 5 s Belichtungszeit mit automatischem Wellenlängenscan). Das resultierende XCT-Signal ist in (a) (Schrägsicht) bzw. (b) (gewichtete Projektion) dargestellt. Die Struktur wurde rekonstruiert. Durch die Verwendung des neuen Spektrometers mit besserer spektraler Auflösung war eine Entfaltung der PSF nicht notwendig und die Proben-Response konnte direkt mit dem PR-XCT-Algorithmus (Schritt 1: 5×200 Iter. mit HIO $\nu = 0,2$, Schritt 2: 100 Iter., Schritt 3: 1×500 Iter. mit GS, $\zeta_{\text{max}} - \zeta_{\text{min}} = 420$ nm) an jedem Punkt unabhängig voneinander rekonstruiert werden. Das Ergebnis ist in (c) bzw. (d) gezeigt. Die Artefakte konnten beseitigt werden. Wieder tritt eine SiO_2 -Schicht auf. (e) bzw. (f) zeigt das mit Hilfe der LR-Algorithmus (10 Iter.) entfaltete PR-XCT-Signal. Die axiale Auflösung der Messung beträgt 38 nm.

Spektrometers war für die PR-XCT-Rekonstruktion der Messung *keine* Schätzung und Entfaltung der spektralen PSF mehr nötig. Der Algorithmus konvergierte an jedem Punkt mit den nicht weiter bearbeiteten gemessenen Reflektivitäten stabil zur richtigen Lösung.

Für die Abschätzung der Sensitivität der Messung, also der minimal mit XCT messbaren Reflektivität einer Schicht, wurde die Signalstärke der Goldschicht bei etwa 220 nm mit der Stärke des Rauschens der Messung verglichen. Das hier gezeigte Signal liegt etwa zwei Größenordnungen überhalb des Rauschpegels der Messung. Verantwortlich für den Rauschpegel sind hauptsächlich die Schwankungen der Laserquelle und das Ausleserauschen der Kamera. Die Reflektivität der vergrabenen Goldschicht kann aufgrund der durchgeführten Referenzmessungen auf bekannten Proben direkt aus den Messdaten

bestimmt werden und liegt bei $\sqrt{R_1 R_{\text{Au}}} \approx 5 \times 10^{-4}$ ⁴⁰. Somit könnten Reflektivitäten bis $\approx 5 \times 10^{-6}$ in dieser Konfiguration detektiert werden. Im Vergleich zu den Sensitivitäten von OCT-Geräten im Infrarotbereich [3, S.66ff] ist dieser Wert zwar gering, doch er reicht bereits aus, um auch sehr dünne Schichten, wie die gefundene Oxidschicht registrieren zu können. Die zusätzlichen zwei Größenordnungen bis zur Detektionsgrenze entsprechen einer Eindringtiefe von etwa $1\mu\text{m}$ in Silizium. Die Goldschicht würde also noch bis zu einer Tiefe von etwa $1,2\mu\text{m}$ detektierbar sein. Es sei hier darauf hingewiesen, dass für die gezeigte Messung die Geschwindigkeit und nicht die Sensitivität optimiert wurde. Durch längere Belichtungszeiten und damit längerer Mittelung und höherem Signal auf der CCD, kann die Sensitivität in Zukunft gesteigert werden. Die spektrale Auflösung des entwickelten Spektrometers im Silizium-Transmissionsfenster unterstützt Eindringtiefen von bis zu $3\mu\text{m}$. Erst bei noch größeren Tiefen wird das Signal durch die spektrale PSF des Spektrometers signifikant abgeschwächt.

⁴⁰Die Abhängigkeit der Reflektivitäten von der Photonenenergie wurde vernachlässigt

8 Ausblick

Die in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse und Erkenntnisse sind die Grundlagen für die zukünftige Weiterentwicklung und Anwendung von XCT. Es wurden bereits viele auf dieser Arbeit aufbauende und weiterführende Projekte initiiert und zum Teil auch schon begonnen. Im Folgenden werden die wichtigsten Nachfolge- bzw. weiterführenden Projekte kurz vorgestellt.

8.1 XCT mit Referenzmembran

Wie bereits in Kapitel 7 beschrieben, wurde das entwickelte XCT-Mikroskop so geplant und aufgebaut, dass es um eine echte Referenz erweitert werden kann [42]. Dazu muss eine wenige Nanometer dicke Membran in einem Abstand von einigen hundert Nanometern vor der Probe positioniert werden. Diese Membran dient dann gleichzeitig als Strahlteiler und als Referenzspiegel. Als Membranmaterial eignet sich Siliziumnitrit (Si_3N_4). Da die Membran, also der Strahlteiler, im fokussierten Strahl steht, kann die Membranfläche im Gegensatz zum klassischen Interferometer sehr klein sein (wenige Mikrometer). Auf kleinen Durchmessern sind Siliziumnitrit-Membranen mit sehr glatter nicht gewellter Oberfläche in vielen Dicken kommerziell erhältlich. Weil die Membran vor der Probe platziert wird, ist reines Time-Domain-OCT nicht möglich, da die Referenzarmlänge nur bis maximal zur Probenoberfläche verfahren werden kann. Entsprechend wird genau wie bei der herkömmlichen XCT Fourier-Domain-OCT durchgeführt. Streng genommen ist das aufgenommene Signal wieder nur eine Autokorrelation, diesmal jedoch aus der Kombination von Probe und Membran. Wird die Membran in einer Entfernung vor der Probe positioniert, die größer ist als die maximale Strukturtiefe bzw. durch die Probenabsorption maximal noch detektierbare Strukturtiefe, so erscheinen sämtliche Autokorrelationsartefakte vor der eigentlichen Probenoberfläche (in geringerer Tiefe) und können somit ohne weitere algorithmische Bearbeitung komplett beseitigt werden. Sollte der notwendige Abstand so groß sein, dass die zugehörige Modulationsfrequenz vom Spektrometer nicht mehr aufgelöst werden kann, ist es auch möglich, zwei Messungen desselben lateralen Punktes (A-Scans) mit zwei leicht unterschiedlichen Membran-Abständen durchzuführen. Nur das tatsächliche Probensignal bewegt sich dann mit der Membranposition, während die Autokorrelationsartefakte in ihrer Tiefe fest sind. Entsprechend können sie dann einfach aus dem XCT-Signal entfernt werden. Die große Herausforderung dieses Konzeptes ist seine technische Umsetzung, da es sich im Prinzip um einen vollständigen interferometrischen Aufbau handelt. Die Folie muss mit großer Genauigkeit parallel zur Probenoberfläche positioniert werden (über die laterale Fläche des Fokus, sollte der Abstand nicht mehr als wenige Nanometer variieren, da sonst die Auflösung verschlechtert wird). Der Abstand

muss auf wenige Nanometer stabil gehalten und von Schwingungen entkoppelt werden. Probe und Folie müssen dann noch auf die einfallende XUV-Strahlung ausgerichtet werden können und die Probe hinter der Folie muss lateral verfahrbar sein. Wie in Kapitel 7 beschrieben, wurden dafür elf piezomotorisierte Achsen implementiert. Der Abstand der Folie zur Probe wird mit drei kapazitiven als auch mit drei optischen Sensoren permanent gemessen und mit den Piezomotoren aktiv stabilisiert. Der gesamte Aufbau ist an Federn aufgehängt, um Schwingungen zu entkoppeln.

Die Membran-XCT hat großes Potential, da sie ohne Phasenrekonstruktion eindeutige Ergebnisse liefert und so beliebige Proben untersucht werden können. Zwar liefert die PR-XCT ebenfalls eindeutige Ergebnisse mit einem technisch wesentlich einfacheren Aufbau, es ist jedoch zu erwarten, dass bei sehr komplizierten Tiefenstrukturen das messbedingte Rauschen die Konvergenz des PR-XCT-Algorithmus stört oder sogar verhindert. Die Eindeutigkeit der Membran-XCT wird durch Messrauschen dagegen nicht gestört und sie sollte damit robuster und universeller einsetzbar sein als PR-XCT, wenn die technischen Hürden gemeistert werden. Erste Testmessungen zeigen eine Stabilität des Folienabstands von weniger als 10 nm unter Messbedingungen (sämtliche Vakuumpumpen sind in Betrieb). Es ist deshalb zu erwarten, dass die in naher Zukunft geplanten ersten Messungen erfolgreich sein werden. Die Membran-XCT lässt sich auch mit dem PR-XCT-Algorithmus kombinieren, um weitere Informationen wie die spektrale Phase und damit Materialeigenschaften zu erhalten (siehe auch Abschnitt 8.4).

8.2 Verkürzung der Messdauer von XCT

Mit der zur Verfügung stehenden HHG-Quelle konnten Belichtungszeiten von 5 s pro lateralem Punkt (A-Scan) bei den gezeigten Proben erreicht werden. Bei sonst gleichen Laserparametern kann der verfügbare XUV-Photonenfluss durch eine Steigerung der Repetitionsrate bzw. der Durchschnittsleistung des Lasersystems erhöht werden, um die Messzeiten zu verkürzen. Da die Zentralwellenlänge bei der implementierten HHG-Quelle durchgestimmt werden muss, um ein glattes Spektrum zu erhalten, ist man bei dieser Lösung aber eher durch die minimale Zeit des Wellenlängenscans (etwa 1 s) als durch zu geringen Fluss begrenzt. In Zukunft soll ein neues Faserlasersystem mit hoher Durchschnittsleistung und zusätzlicher Pulskompression die jetzige Laserquelle ersetzen [31]. Durch die Verwendung von Pulsen mit wenigen optischen Zyklen wird die starke Modulation der harmonischen Struktur abgeschwächt und es entsteht ebenfalls ein bereits glattes XUV-Kontinuum, ohne das ein Wellenlängenscan notwendig ist (siehe auch Kap. 5.1.3). Durch die erhöhte Durchschnittsleistung und die etwas geringere Zentralwellenlänge des Faserlasers wird eine Verkürzung der Messzeit um den Faktor 10-50 erwartet. Die Dauer, die für das Auslesen der Spektrometer-CCD notwendig ist, kann durch „Binning“

(Auslesen als Zeilenkamera) signifikant verkürzt werden. Je nach Signalstärke der Probe wird dann eine Geschwindigkeit von etwa 1-10 lateralen Punkten (A-Scans) pro Sekunde erwartet.

8.3 Verbesserung der lateralen Auflösung

Aus Kostengründen wurde das XCT-Mikroskop zunächst mit kleiner NA realisiert. Die erreichte laterale Auflösung ist daher mit etwa $23\text{ }\mu\text{m}$ um fast drei Größenordnungen schlechter als die axiale Auflösung. Obwohl bereits Anwendungen von XCT mit geringer NA in der dreidimensionalen Untersuchung von (Mehrlagen-)Beschichtungen beispielsweise von optischen oder XUV-Spiegeln, funktionalen axialen Strukturen in Solarzellen oder axial strukturierten Halbleitern (Graphen-basierte Elektronik) absehbar sind, würde eine Verbesserung der lateralen Auflösung in den Nanometerbereich ein noch wesentlich breiteres Anwendungspotential für XCT erschließen. Deshalb wurden mehrere Projekte initiiert, deren Ziel die Evaluation und Umsetzung von alternativen kostensparenden Ansätzen zur Verbesserung der lateralen Auflösung ist.

8.3.1 XUV-Schwarzschild-Objektiv

Die konzeptionell einfachste Methode zur Steigerung der lateralen Auflösung von XCT wäre die Verwendung von off-axis-Ellipsoiden unter streifendem Einfall, welche den Quellpunkt der XUV-Strahlung mit hoher NA verkleinert auf die Probe abbilden. Ein derartige Optik müsste extreme Krümmungsradien mit hoher Formtreue und sehr geringen Rauigkeiten besitzen. Die Herstellung solcher Optiken ist extrem aufwendig und damit teuer. Optiken, die unter senkrechtem Einfall fokussieren, können jedoch sphärisch sein und sind deshalb einfacher herzustellen. Ohne eine entsprechende Mehrlagenbeschichtung hätte ein solcher Spiegel allerdings eine nicht praktikable Reflektivität im XUV. Da XCT ein breites Spektrum benötigt, muss die Mehrlagenbeschichtung zusätzlich breitbandig sein. Da derartige Beschichtungen nicht üblich sind, wurde zusammen mit der Firma optiX fab GmbH eine weltweit einzigartige Beschichtung entwickelt, welche eine Bandbreite (FWHM) von 10 eV bei einer Mittenphotonenenergie von 60 eV mit einer Effizienz von 20% reflektiert. Diese Beschichtung wurde auf ein für den XUV-Bereich hergestelltes Schwarzschild-Objektiv (SSO) [127] bestehend aus einem großen konvexen sphärischen Spiegel mit zentralem Loch und einem kleinen konkaven Spiegel aufgebracht. Das Objektiv besitzt eine NA von 0,19 und bei der angegebenen Mittenphotonenenergie damit eine beugungsbegrenzte laterale Auflösung von etwa 70 nm. Die Bandbreite der Beschichtung verspricht eine axiale Auflösung von ebenfalls etwa 70 nm. Somit würde mit XCT eine Auflösung von unter 100 nm in allen Raumdimensionen erreicht. Es wurden mit dem

Objektiv bereits erste Testmessungen, zunächst als konventionelle abbildende Optik hinter einer transmittierenden Probe durchgeführt [128].

8.3.2 Kombination von XCT und CDI

Die Schwierigkeit, geeignete Optiken mit hoher NA im XUV zu fertigen, ist auch bei anderen Mikroskopiemethoden ein Hindernis. Unter anderem deshalb wurden linsenlose Abbildungsverfahren wie CDI [9] oder Ptychographie [10] entwickelt. Dazu wird kohärentes Licht auf die zu untersuchende Probe fokussiert. Das gestreute Licht wird direkt und ohne weitere Optiken auf einem zweidimensionalen Detektor aufgenommen. Aus den Beugungsbildern wird dann mit Hilfe von zweidimensionalen Phasenrekonstruktionsalgorithmen [65] die laterale Struktur der Probe errechnet. Die laterale Auflösung ist durch den Abstand und die Größe des Detektors bestimmt und nicht durch Optiken beschränkt. Es wird eine Vielzahl von Phasenrekonstruktionsalgorithmen entwickelt, die diese Verfahren immer weiter verbessern und die sie konkurrenzfähig gegenüber konventionellen Abbildungen machen. Um dreidimensionale Abbildungen zu erhalten, müssen die Proben typischerweise in Transmissionsgeometrie tomographiert werden, indem die Beugungsbilder unter vielen Winkeln aufgenommen werden. Da, bis auf sehr neue Ansätze [70], die Strahlung für die linsenlosen Abbildungsverfahren monochromatisch sein muss, geht bei der Verwendung von laborbasierten HHG-Quellen viel Photonenfluss verloren. Daher ist eine Kombination aus XCT und CDI aus zweierlei Hinsicht sinnvoll. CDI erreicht eine hohe laterale Auflösung, wohingegen XCT eine hohe axiale Auflösung erzeugt. Das kombinierte Verfahren würde in Reflexionsgeometrie arbeiten und zerstörungsfrei sein. Es könnten also Proben dreidimensional abgebildet werden, die nicht in dünne Schichten zerschnitten werden müssen, wie bei der transmittierenden CDI-Tomographie. Außerdem wird die Breitbandigkeit der laborbasierten XUV-Quellen effizient zur Bildgebung genutzt. Für die Realisierung der Kombination müssen zukünftig sowohl die technischen Aufbauten als auch die Phasenrekonstruktionsalgorithmen von CDI und XCT miteinander verknüpft werden.

8.4 XCT mit Materialkontrast

Der PR-XCT-Algorithmus rekonstruiert neben der eindeutigen axialen Struktur auch die komplette spektrale Phase. Die Phase trägt Informationen über die Absorption und Dispersion der Materialien in der Probe. Eine entsprechende spektroskopische Auswertung der Daten verspricht neben der axialen Auflösung auch eine Materialauflösung. Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte XCT-Modell (siehe Kapitel 4.2) sowie der PR-XCT-Algorithmus (siehe Kapitel 6.1) bilden die Grundlage für diese Auswertung. Jede Schicht im Signal enthält Dispersion und Absorption der darüber liegenden Schichten. Damit

werden auch Absorptionsinformationen zugänglich, die zur Auswertung der elektronischen Strukturen innerhalb der Probe und an Grenzflächen verwendet werden könnten [129]. Zusätzliche Variationen der Eingangspolarisation der XUV-Strahlung könnten auch ellipsometrie-artige XCT-Messungen erlauben und damit die Messgenauigkeit der Materialeigenschaften erhöhen. Eine Kombination aus Membran-XCT und PR-XCT kann ebenfalls die Materialauflösung verbessern, da die Phasenrekonstruktion dann bereits mit einem eindeutigen Struktursignal starten würde.

8.5 XCT im Wasserfenster

Bereits im Proof-of-Concept am Synchrotron [7] wurde XCT im Wasserfenster durchgeführt. Dabei wurde eine axiale Auflösung besser als 8 nm erreicht⁴¹. Die hohe Auflösung, die hohe Eindringtiefe in biologische Proben und die Tatsache, dass viele Materialien Absorptionskanten im Wasserfenster haben, die spektroskopisch untersucht werden können, sind Anlass, die Wasserfenster-XCT auch laborbasiert zu realisieren. Bestehende HHG-Quellen sind dazu in diesem Bereich (noch) nicht effizient genug. Deshalb soll in Zukunft zunächst ein Laserplasma als Strahlungsquelle verwendet werden. Es besteht dazu eine Kollaboration mit einer polnischen Arbeitsgruppe, die Expertise im Bau von Laserplasmaquellen sowie in der XUV-Mikroskopie hat und kürzlich sogar erstmals laborbasierte Wasserfenster-XCT demonstrieren konnte [130].

8.6 Zeitaufgelöste XCT

Da die verwendete HHG-Quelle für das aufgebaute XCT-Mikroskop mit kurzen Laserpulsen betrieben wird, ist auch die XUV-Strahlung zeitlich sehr kurz. Die Pulsdauer der XUV-Strahlung ist höchstens so lang wie der Laserpuls selber (etwa 50 fs). Wird jedoch die Pulsdauer des Lasers derart verkürzt, dass im besten Falle nur noch ein optischer Halbzyklus vorhanden ist, wird ein einzelner XUV-Puls mit einer Dauer von wenigen Attosekunden ausgesendet [11]. Laserbasierte XCT besitzt also eine intrinsisch hohe Zeitauflösung. Entsprechend sind bildgebende Anrege-Abfrage-Experimente möglich. Dazu kann ein Teil der Laserstrahlung vor der HHG-Erzeugung ausgekoppelt und in einem optischen Interferometer zeitlich gegenüber dem HHG-erzeugenden Puls verschoben werden. So könnten zum Beispiel Ionisationsprozesse in Festkörpern, welche die optischen Eigenschaften im XUV-Bereich ändern [12], dynamisch abgebildet werden.

⁴¹Es wurde die Unterscheidbarkeit zweier nah beieinander liegender Strukturen untersucht. Die Breite eines zu einer Schicht gehörenden Maximums im Signal lag aber bei etwa 3 nm (FWHM).

9 Zusammenfassung

In dieser Doktorarbeit wird das Konzept und die Realisierung von laserbasierter optischer Kohärenztomographie im extrem ultravioletten (XUV) Spektralbereich - kurz XCT - behandelt. XCT ist eine dreidimensionale Mikroskopiemethode, welche eine axiale Auflösung von wenigen Nanometern erreichen kann [1]. In dieser Arbeit wurde ein XCT-Modell zur Rekonstruktion der axialen Probenstruktur entwickelt, welches die Wechselwirkung zwischen XUV-Licht und der zu untersuchenden Probe beinhaltet. Dieses Modell ist für absorbierende Proben unter beliebigen Einfallswinkeln gültig und erweitert so ein bekanntes Modell aus der optischen Kohärenztomographie (OCT) [2, 3]. Da die Information über Absorption und Dispersion im XCT-Modell enthalten ist, ermöglicht es prinzipiell auch materialaufgelöste Messungen.

Ein wesentliches Ziel dieser Arbeit war es, das neuartige Mikroskopieverfahren XCT, welches bisher nur an Synchrotronquellen demonstriert wurde, mit einer laserbasierten XUV-Quelle im Labormaßstab umzusetzen. Durch die Erzeugung hoher Harmonischer von infraroter Laserstrahlung [4] konnte eine breitbandige XUV-Quelle mit ausreichend hohem Fluss ($\approx 0,2 \text{ nW/eV}$ über gesamte Bandbreite) im Siliziumtransmissionsfenster von $30 \text{ eV} - 100 \text{ eV}$ realisiert werden [5]. Es wurde ein komplett überarbeitetes und an die Laserquelle angepasstes XCT-Mikroskop entworfen und aufgebaut, sodass XCT nun routinemäßig eingesetzt werden kann [6]. Das XCT-Mikroskop, bestehend aus XUV-Quelle, Fokussieroptik und eigentlicher Messkammer ist ein etwa 3 m langer Vakuumaufbau.

Die laserbasierten XCT-Messungen wurden mit synchrotronbasierten Daten verglichen und zeigen eine gute Übereinstimmung. Die erreichte axiale Auflösung ist mit $\approx 30 \text{ nm}$ ⁴² mit der am Synchrotron erreichten Auflösung von $\approx 20 \text{ nm}$ vergleichbar [7]. Sie ist damit um etwa 2-3 Größenordnungen besser als die Auflösung von konventioneller OCT [8].

Das im Rahmen dieser Arbeit realisierte XCT-Mikroskop verwendet keinen Strahlteiler zur Erzeugung einer Referenzwelle, sondern nutzt die Oberfläche der Probe als Referenz. Somit ist die interferometrische Stabilität intrinsisch gegeben und vereinfacht dadurch den experimentellen Aufbau erheblich. Dies hat allerdings den Nachteil, dass Autokorrelations-Artefakte die eigentliche Probenstruktur überlagern. Eine eindeutige Rekonstruktion der axialen Struktur war deshalb bisher nicht möglich [1, 7]. In dieser Arbeit wird ein neuartiger eindimensionaler Phasenrekonstruktionsalgorithmus vorgestellt, der in der Lage ist, die Probenstruktur aus dem XCT-Signal eindeutig zu rekonstruieren. Dreidimensional strukturierte, siliziumbasierte Proben wurden untersucht und die Messdaten mit dem PR-XCT genannten Algorithmus prozessiert [6]. Mit der Beseitigung der Artefakte und damit der Möglichkeit, unbekannte Proben zu untersuchen, wurde ein weiteres Ziel dieser

⁴²Die Auflösung hängt neben der verfügbaren Bandbreite auch von der verwendeten Fourier-Fensterfunktion zur Unterdrückung von Überschwängern ab.

Arbeit erreicht.

Durch XCT-Messungen wurde eine dünne Schicht in einer Probe gefunden, die nicht Teil der ursprünglich geplanten Probenstruktur war. Diese Existenz dieser Schicht und damit die XCT-Messung konnte erst durch eine Messung mit einem Transmissionselektronenmikroskop bestätigt werden. Dazu musste allerdings eine dünne Lamelle aus der Probe herausgeschnitten werden, sodass diese zerstört wurde. Ein Rasterelektronenmikroskop konnte die Schicht dagegen nicht auflösen. Es stellte sich heraus, dass sich beim Herstellungsprozess in Folge einer kurzzeitigen Belüftung der Vakuumanlage eine zusätzliche 1-2 nm dicke SiO₂-Schicht gebildet hat. Damit zeigt sich eindrucksvoll ein großer Vorteil der XUV-Mikroskopie. Während Sauerstoff im XUV-Bereich einen hohen Kontrast gegenüber anderen leichten Materialien wie Silizium besitzt, ist der Kontrast im Elektronenmikroskop sehr schwach.

Die Umsetzung von XCT beschränkt sich in dieser Arbeit auf kleine numerische Aperturen (NA), da breitbandige XUV-Optiken mit hoher numerischer Apertur (NA) technisch extrem aufwendig sind. Die laterale Auflösung der laserbasierten XCT liegt deshalb bei etwa 23 μm . Im Vergleich zu den synchrotronbasierten Daten konnte immerhin eine Verbesserung um den Faktor 10 erreicht werden. Die axiale Auflösung in der jetzigen Form von XCT ist dennoch um mehrere Größenordnungen besser als die laterale. Selbst mit dieser technischen Einschränkung erschließen sich aber bereits Anwendungsfelder bei der dreidimensionalen Untersuchung von (Mehrlagen-)Beschichtungen beispielsweise von optischen oder XUV-Spiegeln, funktionalen axialen Strukturen in Solarzellen oder axial strukturierten Halbleitern wie beispielsweise Graphen-basierter Elektronik. Auch die Abbildung biologischer lateral homogener Membranen ist denkbar. XCT mit hoher NA und damit Nanometerauflösung in allen Raumdimensionen hat noch ein wesentlich größeres Anwendungspotential, beispielsweise bei der Untersuchung von Halbleiterstrukturen, lithografischer Masken oder der Abbildung von biologischen Strukturen mit den im XUV-Bereich vorteilhaften und einzigartigen Bildentstehungskontrasten. Eine zukünftige Kombination von XCT mit den linsenlosen Verfahren wie „Coherent Diffraction Imaging“ [9] und Ptychographie [10] könnte ein vielversprechender Ansatz sein, die laterale Auflösung von XCT zu verbessern. Zusätzlich zur dreidimensionalen Abbildung kann zukünftig auch die intrinsische Zeitauflösung der hohen Harmonischen im Femto- oder sogar Attosekundenbereich [11] für die zeitaufgelöste Bildgebung von ultraschnellen Prozessen in Festkörpern [12] ausgenutzt werden.

Danksagung

Ich möchte mich hiermit bei allen Kollegen und Mitarbeitern des Instituts für Optik und Quantenelektronik und des Helmholtz-Instituts Jena sowie allen anderen Beteiligten bedanken, die zum Gelingen dieser Doktorarbeit beigetragen haben. Insbesondere möchte ich mich bedanken bei

- meinem Betreuer Prof. Dr. Gerhard G. Paulus, der mich bei allen Vorhaben und Projekten immer vollends unterstützt hat. Insbesondere bedanke ich mich dafür, dass er es mir ermöglicht hat, das über die Jahre gewachsene XCT-Projekt mit mehreren Doktoranden und Studenten zu einem großen Teil in Eigenverantwortung zu bearbeiten und zu leiten. Durch seine vertrauensvolle Art und seine „immer geöffnete Tür“ habe ich mich dabei nie allein gelassen gefühlt.
- Martin Wünsche, Johann Jakob Abel, Jan Nathanael und Julius Reinhard, die mit unermüdlichem Einsatz und in so mancher Nachtschicht mit mir das Mikroskop aufgebaut und die Messungen durchgeführt haben. Ohne euch würde XCT in seiner jetzigen Form nicht existieren.
- allen, die bisher an XCT mitgewirkt haben. Das sind neben den oben genannten: Christian Rödel, Max Möller, Arno Krause, Julius Biedermann, Stefan Aull und Slawomir Skruszewicz.
- Martin Wünsche, der mich von Anfang an immer unterstützt und so manche „Kohlen aus dem Feuer“ geholt hat. Das von ihm mit Hingabe zur sprichwörtlichen „eierlegenden Wollmilchsau“ entwickelte XUV-Spektrometer macht XCT wesentlich leistungsfähiger.
- Christian Rödel, der mir immer mit Rat und Tat zur Seite stand und immer bereit ist, zu helfen. Die vielen Diskussionen über eigentlich fast alle Themen waren sehr bereichernd.
- Thomas Weber, der so manches ingenieurtechnische Problem gelöst hat.
- allen Mitarbeitern der Werkstätten der Fakultät für die Fertigung der vielen benötigten Bauteile.
- Dr. Uwe Hübner und seinen Kollegen für die Herstellung der lateral strukturierten Proben.
- Dr. Torsten Feigl und Kollegen für die Herstellung der Schichtsysteme.

- Prof. Dr. Carsten Ronning und Dr. Philipp Schöppe für REM- und TEM-Messungen.
- meiner Familie für ihre liebevolle Unterstützung.
- meiner Frau Katharina, die mir immer den Rücken freigehalten hat und mich gerade in anstrengenden Zeiten immer wieder aufgemuntert und bestärkt hat.
- meinen Freunden für die tolle Zeit in Jena.

Literaturverzeichnis

- [1] FUCHS, S. ; BLINNE, A. ; RÖDEL, C. ; ZASTRAU, U. ; HILBERT, V. ; WÜNSCHE, M. ; BIERBACH, J. ; FRUMKER, E. ; FÖRSTER, E. ; PAULUS, G. G.: Optical coherence tomography using broad-bandwidth XUV and soft X-ray radiation. In: *Applied Physics B* 106 (2012), Nr. 4, S. 789–795. <http://dx.doi.org/10.1007/s00340-012-4934-8>. – DOI 10.1007/s00340-012-4934-8
- [2] HUANG, D. ; SWANSON, E. ; LIN, C. ; SCHUMAN, J. ; STINSON, W. ; CHANG, W. ; HEE, M. ; FLOTTE, T. ; GREGORY, K. ; PULIAFITO, C. ; FUJIMOTO, J. G.: Optical coherence tomography. In: *Science* 254 (1991), Nr. 5035, S. 1178–1181. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1957169>. – DOI 10.1126/science.1957169
- [3] DREXLER, W. ; FUJIMOTO, J. G.: *Optical Coherence Tomography*. Springer Verlag, 2008
- [4] FERRAY, M. ; L'HUILLIER, A. ; LI, X. F. ; LOMPRES, L. A. ; MAINFRAY, G. ; MANUS, C.: Multiple-harmonic conversion of 1064 nm radiation in rare gases. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 21 (1988), Nr. 3, S. L31–L35. <http://dx.doi.org/10.1088/0953-4075/21/3/001>. – DOI 10.1088/0953-4075/21/3/001
- [5] WÜNSCHE, M. ; FUCHS, S. ; AULL, S. ; NATHANAEL, J. ; MÖLLER, M. ; RÖDEL, C. ; PAULUS, G. G.: Quasi-supercontinuum source in the extreme ultraviolet using multiple frequency combs from high-harmonic generation. In: *Optics Express* 25 (2017), Nr. 6, S. 6936. <http://dx.doi.org/10.1364/OE.25.006936>. – DOI 10.1364/OE.25.006936
- [6] FUCHS, S. ; WÜNSCHE, M. ; NATHANAEL, J. ; ABEL, J. J. ; RÖDEL, Christian ; BIEDERMANN, J. ; REINHARD, J. ; HÜBNER, U. ; PAULUS, G. G.: Optical coherence tomography with nanoscale axial resolution using a laser-driven high-harmonic source. In: *Optica* 4 (2017), Nr. 8, S. 903. <http://dx.doi.org/10.1364/OPTICA.4.000903>. – DOI 10.1364/OPTICA.4.000903
- [7] FUCHS, S. ; RÖDEL, C. ; BLINNE, A. ; ZASTRAU, U. ; WÜNSCHE, M. ; HILBERT, V. ; GLASER, L. ; VIEFHAUS, J. ; FRUMKER, E. ; CORKUM, P. ; FÖRSTER, E. ; PAULUS, G. G.: Nanometer resolution optical coherence tomography using broad bandwidth XUV and soft x-ray radiation. In: *Scientific Reports* 6 (2016), S. 20658. <http://dx.doi.org/10.1038/srep20658>. – DOI 10.1038/srep20658
- [8] LEITGEB, R. ; DREXLER, W. ; UNTERHUBER, A. ; HERMANN, B. ; BAJRASZEWSKI, T. ; LE, T. ; STINGL, A. ; FERCHER, A.: Ultrahigh resolution Fourier domain optical coherence tomography. In: *Optics express* 12 (2004), Nr. 10, S. 2156–65
- [9] CHAPMAN, H. N. ; NUGENT, K. A.: Coherent lensless X-ray imaging. In: *Nature Photonics* 4 (2010), Nr. 12, S. 833–839. <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2010.240>. – DOI 10.1038/nphoton.2010.240
- [10] DIEROLF, M. ; MENZEL, A. ; THIBAUT, P. ; SCHNEIDER, P. ; KEWISH, C. M. ; WEPF, R. ; BUNK, O. ; PFEIFFER, F.: Ptychographic X-ray computed tomography at the nanoscale. In: *Nature* 467 (2010), Nr. 7314, S. 436–439. <http://dx.doi.org/10.1038/nature09419>. – DOI 10.1038/nature09419
- [11] CORKUM, P. B. ; KRAUSZ, F.: Attosecond science. In: *Nature Physics* 3 (2007), Nr. 6, S. 381–387. <http://dx.doi.org/10.1038/nphys620>. – DOI 10.1038/nphys620

- [12] SCHULTZE, M. ; RAMASESHA, K. ; PEMMARAJU, C. D. ; SATO, S. A. ; WHITMORE, D. ; GANDMAN, A. ; PRELL, J. S. ; BORJA, L. J. ; PRENDERGAST, D. ; YABANA, K. ; NEUMARK, D. M. ; LEONE, S. R.: Attosecond band-gap dynamics in silicon. In: *Science* 346 (2014), Nr. 6215, S. 1348–1352. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1260311>. – DOI 10.1126/science.1260311
- [13] SCHAWLOW, A. L. ; TOWNES, C. H.: Infrared and Optical Masers. In: *Physical Review* 112 (1958), Nr. 6, S. 1940–1949. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.112.1940>. – DOI 10.1103/PhysRev.112.1940
- [14] MAIMAN, T. H.: Stimulated Optical Radiation in Ruby. In: *Nature* 187 (1960), Nr. 4736, S. 493–494. <http://dx.doi.org/10.1038/187493a0>. – DOI 10.1038/187493a0
- [15] MINSKY, M.: Microscopy Apparatus. In: *US Patent* (1961), Nr. US3013467
- [16] MINSKY, M.: Memoir on inventing the confocal scanning microscope. In: *Scanning* 10 (1988), Nr. 4, S. 128–138. <http://dx.doi.org/10.1002/sca.4950100403>. – DOI 10.1002/sca.4950100403
- [17] DAVIDOVITS, P. ; EGGER, M. D.: Scanning Laser Microscope. In: *Nature* 223 (1969), Nr. 5208, S. 831–831. <http://dx.doi.org/10.1038/223831a0>. – DOI 10.1038/223831a0
- [18] DAVIDOVITS, P. ; EGGER, M. D.: Scanning Laser Microscope for Biological Investigations. In: *Applied Optics* 10 (1971), Nr. 7, S. 1615. <http://dx.doi.org/10.1364/AO.10.001615>. – DOI 10.1364/AO.10.001615
- [19] CREMER, C. ; CREMER, T.: Considerations on a laser-scanning-microscope with high resolution and depth of field. In: *Acta Microscopica* 81 (1978), Nr. 1, S. 31–44
- [20] KNOLL, M. ; RUSKA, E.: Das Elektronenmikroskop. In: *Zeitschrift für Physik* 78 (1932), Nr. 5, S. 318–339. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01342199>. – DOI 10.1007/BF01342199
- [21] ABBE, E.: Beiträge zur Theorie des Mikroskops und der mikroskopischen Wahrnehmung. In: *Archiv für mikroskopische Anatomie* 9 (1873), Nr. 1, S. 413–418. <http://dx.doi.org/10.1007/BF02956173>. – DOI 10.1007/BF02956173
- [22] ATTWOOD, D.: *Soft X-Rays and Extreme Ultraviolet Radiation: Principles and Applications*. Cambridge University Press, 2000
- [23] KIRZ, J. ; JACOBSEN, C. ; HOWELLS, M.: Soft X-ray microscopes and their biological applications. In: *Quarterly Reviews of Biophysics* 28 (1995), Nr. 01, S. 33. <http://dx.doi.org/10.1017/S0033583500003139>. – DOI 10.1017/S0033583500003139
- [24] WEISS, D. ; SCHNEIDER, G. ; NIEMANN, B. ; GUTTMANN, P. ; RUDOLPH, D. ; SCHMAHL, G.: Computed tomography of cryogenic biological specimens based on X-ray microscopic images. In: *Ultramicroscopy* 84 (2000), Nr. 3-4, S. 185–197. [http://dx.doi.org/10.1016/S0304-3991\(00\)00034-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0304-3991(00)00034-6). – DOI 10.1016/S0304-3991(00)00034-6
- [25] HENKE, B. ; GULLIKSON, E. M. ; DAVIS, J. C.: X-Ray Interactions: Photoabsorption, Scattering, Transmission, and Reflection at $E = 50\text{--}30,000$ eV, $Z = 1\text{--}92$. In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 54 (1993), Nr. 2, S. 181–342. <http://dx.doi.org/10.1006/adnd.1993.1013>. – DOI 10.1006/adnd.1993.1013

- [26] GWYN, C. W.: Extreme ultraviolet lithography. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 16 (1998), Nr. 6, S. 3142. <http://dx.doi.org/10.1116/1.590453>. – DOI 10.1116/1.590453
- [27] WU, B. ; KUMAR, A.: Extreme ultraviolet lithography: A review. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 25 (2007), Nr. 6, S. 1743. <http://dx.doi.org/10.1116/1.2794048>. – DOI 10.1116/1.2794048
- [28] WEISS, M. R. ; HELLWEG, D. ; PETERS, J. H. ; PERLITZ, S. ; GARETTO, A. ; GOLDSTEIN, M.: Actinic review of EUV masks: first results from the AIMS EUV system integration. 9048 (2014), S. 90480X. <http://dx.doi.org/10.1117/12.2046302>. – DOI 10.1117/12.2046302
- [29] FIEDOROWICZ, H. ; BARTNIK, A. ; JAROCKI, R. ; KOSTECKI, J. ; KRZYWIŃSKI, J. ; MIKOŁAJCZYK, J. ; RAKOWSKI, R. ; SZCZUREK, A. ; SZCZUREK, M.: Compact laser plasma EUV source based on a gas puff target for metrology applications. In: *Journal of Alloys and Compounds* 401 (2005), Nr. 1-2, S. 99–103. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2005.02.069>. – DOI 10.1016/j.jallcom.2005.02.069
- [30] VINOKHODOV, A. Y. ; KRIVOKORYTOV, M. S. ; SIDELNIKOV, Y. V. ; KRIVTSUN, V. M. ; MEDVEDEV, V. V. ; KOSHELEV, K. N.: High brightness EUV sources based on laser plasma at using droplet liquid metal target. In: *Quantum Electronics* 46 (2016), Nr. 5, S. 473–480. <http://dx.doi.org/10.1070/QEL16019>. – DOI 10.1070/QEL16019
- [31] HÄDRICH, S. ; KLENKE, A. ; ROTHHARDT, J. ; KREBS, M. ; HOFFMANN, A. ; PRONIN, O. ; PERVAK, V. ; LIMPET, J. ; TÜNNERMANN, A.: High photon flux table-top coherent extreme-ultraviolet source. In: *Nature Photonics* 8 (2014), Nr. 10, S. 779–783. <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2014.214>. – DOI 10.1038/nphoton.2014.214
- [32] BRIZUELA, F. ; HOWLETT, I. D. ; CARBAJO, S. ; PETERSON, D. ; SAKDINAWAT, A. ; LIU, Y. ; ATTWOOD, D. T. ; MARCONI, M. C. ; ROCCA, J. J. ; MENONI, C. S.: Imaging at the nanoscale with practical table-top euv laser-based full-field microscopes. In: *IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics* 18 (2012), Nr. 1, S. 434–442. <http://dx.doi.org/10.1109/JSTQE.2011.2158393>. – DOI 10.1109/JSTQE.2011.2158393
- [33] SEABERG, M. D. ; ZHANG, B. ; GARDNER, D. F. ; SHANBLATT, E. R. ; MURNANE, M. M. ; KAPTEYN, H. C. ; ADAMS, D. E.: Tabletop Nanometer Extreme Ultraviolet Imaging in an Extended Reflection Mode using Coherent Fresnel Ptychography. 1 (2013), Nr. 1, S. 39–44. <http://dx.doi.org/10.1364/OPTICA.1.000039>. – DOI 10.1364/OPTICA.1.000039
- [34] ZÜRCH, M. ; ROTHHARDT, J. ; HÄDRICH, S. ; DEMMLER, S. ; KREBS, M. ; LIMPET, J. ; TÜNNERMANN, A. ; GUGGENMOS, A. ; KLEINEBERG, U. ; SPIELMANN, C.: Real-time and Sub-wavelength Ultrafast Coherent Diffraction Imaging in the Extreme Ultraviolet. In: *Scientific Reports* 4 (2014), S. 7356. <http://dx.doi.org/10.1038/srep07356>. – DOI 10.1038/srep07356
- [35] TORRISI, A. ; WACHULAK, P. ; WEGRZYNSKI, L. ; FOK, T. ; BARTNIK, A. ; PARKMAN, T. ; VONDROVA, S. ; TURNOVA, J. ; JANKIEWICZ, B. J. ; BARTOSEWICZ, B. ; FIEDOROWICZ, H.: A stand-alone compact EUV microscope based on gas-puff target source. In: *Journal of Microscopy* 265 (2017), Nr. 2, S. 251–260. <http://dx.doi.org/10.1111/jmi.12494>. – DOI 10.1111/jmi.12494
- [36] TADESSE, G. K. ; KLAS, R. ; DEMMLER, S. ; HÄDRICH, S. ; WAHYUTAMA, I. ; STEINERT, M. ; SPIELMANN, C. ; ZÜRCH, M. ; TÜNNERMANN, A. ; LIMPET, J. ; ROTHHARDT, J.: High

- Speed and High Resolution Table-Top Nanoscale Imaging. In: *Optics letters* 41 (2016), Nr. 22, S. 2–6. <http://dx.doi.org/10.1364/OL.41.005170>. – DOI 10.1364/OL.41.005170
- [37] FOGELQVIST, E. ; KÖRDEL, M. ; CARANNANTE, V. ; ÖNFELT, B. ; HERTZ, H. M.: Laboratory cryo x-ray microscopy for 3D cell imaging. In: *Scientific Reports* 7 (2017), Nr. 1, S. 1–8. <http://dx.doi.org/10.1038/s41598-017-13538-2>. – DOI 10.1038/s41598-017-13538-2
- [38] PAULUS, G. G. ; RÖDEL, C.: Short-wavelength coherence tomography. In: *US Patent* (2010), Nr. US7,656,538B2
- [39] BLINNE, A.: *Kohärenztomographie mit kurzen Wellenlängen*, Jena, Bachelorarbeit, 2011
- [40] FUCHS, S.: *Optische Kohärenztomografie mit kurzen Wellenlängen*, Jena, Diplomarbeit, 2012
- [41] WÜNSCHE, M. ; FUCHS, S. ; PAULUS, G. ; RÖDEL, C.: Verfahren und Vorrichtung zur Erzeugung von Laserlicht mit definierten Spektraleigenschaften. In: *Deutsches Patent* (2016), Nr. DE102014018511
- [42] FUCHS, S. ; RÖDEL, C. ; PAULUS, G. G.: Verfahren und Vorrichtung zur Bestimmung der ein- oder mehrdimensionalen Struktur von Objekten mittels Strahlung kurzer Wellenlänge. In: *Deutsches Patent* (2014), Nr. DE102014007106A1
- [43] SAKDINAWAT, A. ; ATTWOOD, D.: Nanoscale X-ray imaging. In: *Nature Photonics* 4 (2010), Nr. 12, S. 840–848. <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2010.267>. – DOI 10.1038/nphoton.2010.267
- [44] PANTEL, R. ; CHEYNET, M. C. ; TICHELAAR, F. D.: Comparison of Si and Ge low-loss spectra to interpret the Ge contrast in EFTEM images of Si_{1-x}Ge_x nanostructures. In: *Micron* 37 (2006), Nr. 7, S. 657–665. <http://dx.doi.org/10.1016/j.micron.2006.01.008>. – DOI 10.1016/j.micron.2006.01.008
- [45] LE GROS, M. A. ; MCDERMOTT, G. ; CINQUIN, B. P. ; SMITH, E. A. ; DO, M. ; CHAO, W. L. ; NAULLEAU, P. P. ; LARABELL, C. A.: Biological soft X-ray tomography on beamline 2.1 at the Advanced Light Source. In: *Journal of synchrotron radiation* 21 (2014), Nr. Pt 6, S. 1370–7. <http://dx.doi.org/10.1107/S1600577514015033>. – DOI 10.1107/S1600577514015033
- [46] McMULLAN, D.: Scanning electron microscopy 1928–1965. In: *Scanning* 17 (1995), Nr. 3, S. 175–185. <http://dx.doi.org/10.1002/sca.4950170309>. – DOI 10.1002/sca.4950170309
- [47] HOLLER, M. ; GUIZAR-SICAIROS, M. ; TSAI, E. H. R. ; DINAPOLI, R. ; MÜLLER, E. ; BUNK, O. ; RAABE, J. ; AEPPLI, G.: High-resolution non-destructive three-dimensional imaging of integrated circuits. In: *Nature* 543 (2017), Nr. 7645, S. 402–406. <http://dx.doi.org/10.1038/nature21698>. – DOI 10.1038/nature21698
- [48] TAKABA, K. ; HOSHINO, M. ; AOKI, S.: Simple method of confirming wet environment for soft X-ray microscopy to observe hydrated biological specimens. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 51 (2012), Nr. 9, S. 1–6. <http://dx.doi.org/10.1143/JJAP.51.092401>. – DOI 10.1143/JJAP.51.092401

- [49] HUANG, B. ; BABCOCK, H. ; ZHUANG, X.: Breaking the diffraction barrier: Super-resolution imaging of cells. In: *Cell* 143 (2010), Nr. 7, S. 1047–1058. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cell.2010.12.002>. – DOI 10.1016/j.cell.2010.12.002
- [50] KLAR, T. A. ; JAKOBS, S. ; DYBA, M. ; EGNER, A. ; HELL, S. W.: Fluorescence microscopy with diffraction resolution barrier broken by stimulated emission. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 97 (2000), Nr. 15, S. 8206–8210. <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.97.15.8206>. – DOI 10.1073/pnas.97.15.8206
- [51] KLAR, T. A. ; ENGEL, E. ; HELL, S. W.: Breaking Abbe's diffraction resolution limit in fluorescence microscopy with stimulated emission depletion beams of various shapes. In: *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics* 64 (2001), Nr. 6, S. 9. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.64.066613>. – DOI 10.1103/PhysRevE.64.066613
- [52] BETZIG, E. ; PATTERSON, G. H. ; SOUGRAT, R. ; LINDWASSER, O. W. ; OLENYCH, S. ; BONIFACINO, J. S. ; DAVIDSON, M. W. ; LIPPINCOTT-SCHWARTZ, J. ; HESS, H. F.: Imaging Intracellular Fluorescent Proteins at Nanometer Resolution. In: *Science* 313 (2006), Nr. 5793, S. 1642–1645. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1127344>. – DOI 10.1126/science.1127344
- [53] HENRIQUES, R. ; GRIFFITHS, C. ; REGO, E. H. ; MHLANGA, M. M.: PALM and STORM: Unlocking live-cell super-resolution. In: *Biopolymers* 95 (2011), Nr. 5, S. 322–331. <http://dx.doi.org/10.1002/bip.21586>. – DOI 10.1002/bip.21586
- [54] VAN NOORDEN, Richard: Nobel for microscopy that reveals inner world of cells. In: *Nature* 514 (2014), Nr. 7522, S. 286–286. <http://dx.doi.org/10.1038/nature.2014.16097>. – DOI 10.1038/nature.2014.16097
- [55] KOSTER, A. J. ; KLUMPERMAN, J.: Electron microscopy in cell biology: integrating structure and function. In: *Nature reviews. Molecular cell biology* Suppl (2003), S. 6–10. <http://dx.doi.org/10.1038/nrm1194>. – DOI 10.1038/nrm1194
- [56] BILDERBACK, D. H. ; ELLEAUME, P. ; WECKERT, E.: Review of third and next generation synchrotron light sources. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 38 (2005), Nr. 9. <http://dx.doi.org/10.1088/0953-4075/38/9/022>. – DOI 10.1088/0953-4075/38/9/022
- [57] WAGNER, C. ; HARNED, N.: EUV lithography: Lithography gets extreme. In: *Nature Photonics* 4 (2010), Nr. 1, S. 24–26. <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2009.251>. – DOI 10.1038/nphoton.2009.251
- [58] KIRKPATRICK, P. ; BAEZ, A. V.: Formation of optical images by X-rays. In: *Journal of the Optical Society of America* 38 (1948), Nr. 1895, S. 766–774. <http://dx.doi.org/10.1364/JOSA.38.000766>. – DOI 10.1364/JOSA.38.000766
- [59] BARBEE, T. W. ; MROWKA, S. ; HETTRICK, M. C.: Molybdenum-silicon multilayer mirrors for the extreme ultraviolet. In: *Applied Optics* 24 (1985), Nr. 6, S. 883. <http://dx.doi.org/10.1364/AO.24.000883>. – DOI 10.1364/AO.24.000883
- [60] FEIGL, T. ; YULIN, S. ; BENOIT, N. ; KAISER, N.: EUV multilayer optics. In: *Microelectronic Engineering* 83 (2006), Nr. 4-9 SPEC. ISS., S. 703–706. <http://dx.doi.org/10.1016/j.mee.2005.12.033>. – DOI 10.1016/j.mee.2005.12.033

- [61] NIEMANN, B. ; RUDOLPH, D. ; SCHMAHL, G.: Soft X-ray imaging zone plates with large zone numbers for microscopic and spectroscopic applications. In: *Optics Communications* 12 (1974), Nr. 2, S. 160–163. [http://dx.doi.org/10.1016/0030-4018\(74\)90381-2](http://dx.doi.org/10.1016/0030-4018(74)90381-2). – DOI 10.1016/0030-4018(74)90381-2
- [62] KIRZ, J.: Phase zone plates for X-rays and the extreme UV. In: *Journal of the Optical Society of America* 64 (1974), Nr. 3, S. 301–309. <http://dx.doi.org/10.1364/JOSA.64.000301>. – DOI 10.1364/JOSA.64.000301
- [63] CHAO, W. ; HARTENECK, B. D. ; LIDDLE, J. A. ; ANDERSON, E. H. ; ATTWOOD, D. T.: Soft X-ray microscopy at a spatial resolution better than 15 nm. In: *Nature* 435 (2005), Nr. 7046, S. 1210–3. <http://dx.doi.org/10.1038/nature03719>. – DOI 10.1038/nature03719
- [64] WANG, Y. ; YUN, W. ; JACOBSEN, C.: Achromatic Fresnel optics for wideband extreme-ultraviolet and X-ray imaging. In: *Nature* 424 (2003), Nr. 6944, S. 50–53. <http://dx.doi.org/10.1038/nature01756>. – DOI 10.1038/nature01756
- [65] FIENUP, J. R.: Phase retrieval algorithms: a comparison. In: *Applied Optics* 21 (1982), Nr. 15, S. 2758. <http://dx.doi.org/10.1364/AO.21.002758>. – DOI 10.1364/AO.21.002758
- [66] EISEBITT, S. ; LÜNING, J. ; SCHLOTTER, W. F. ; LÖRGEN, M. ; HELLWIG, O. ; EBERHARDT, W. ; STÖHR, J.: Lensless imaging of magnetic nanostructures by X-ray spectro-holography. In: *Nature* 432 (2004), Nr. 7019, S. 885–888. <http://dx.doi.org/10.1038/nature03139>. – DOI 10.1038/nature03139
- [67] ZÜRCH, M. ; SPIELMANN, C.: Extreme ultraviolet digital in-line holography using a tabletop source. In: *Applied Optics* 54 (2015), Nr. 19, S. 5992. <http://dx.doi.org/10.1364/AO.54.005992>. – DOI 10.1364/AO.54.005992
- [68] SANDBERG, R. ; PAUL, A. ; RAYMONDSON, D. ; HÄDRICH, S. ; GAUDIOSI, D. ; HOLTSNIDER, J. ; TOBEY, R. ; COHEN, O. ; MURNANE, M. ; KAPTEYN, H. ; SONG, C. ; MIAO, J. ; LIU, Y. ; SALMASSI, F.: Lensless Diffractive Imaging Using Tabletop Coherent High-Harmonic Soft-X-Ray Beams. In: *Physical Review Letters* 99 (2007), Nr. 9, S. 098103. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.098103>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.99.098103
- [69] ZHANG, B. ; SEABERG, M. D. ; ADAMS, D. E. ; GARDNER, D. F. ; SHANBLATT, E. R. ; SHAW, J. M. ; CHAO, W. ; GULLIKSON, E. M. ; SALMASSI, F. ; KAPTEYN, H. C. ; MURNANE, M. M.: Full field tabletop EUV coherent diffractive imaging in a transmission geometry. In: *Optics Express* 21 (2013), Nr. 19, S. 21970. <http://dx.doi.org/10.1364/OE.21.021970>. – DOI 10.1364/OE.21.021970
- [70] ZHANG, B. ; GARDNER, D. F. ; SEABERG, M. H. ; SHANBLATT, E. R. ; PORTER, C. L. ; KARL, R. ; MANCUSO, C. A. ; KAPTEYN, H. C. ; MURNANE, M. M. ; ADAMS, D. E.: Ptychographic hyperspectral spectromicroscopy with an extreme ultraviolet high harmonic comb. In: *Optics Express* 24 (2016), Nr. 16, S. 18745–18754. <http://dx.doi.org/10.1364/OE.24.018745>. – DOI 10.1364/OE.24.018745
- [71] SALEH, B. E. A. ; TEICH, M. C.: *Fundamentals of Photonics*. John Wiley & Sons, Inc., 2007
- [72] BORN, M. ; WOLF, E.: *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*. 7. Cambridge University Press, 1999

- [73] MICHELSON, A. A. ; MORLEY, E. W.: On the Relative Motion of the Earth and the Luminiferous Ether. In: *American Journal of Science* 36 (1887), Nr. 203, S. 333–345
- [74] FERCHER, A. F. ; ROTH, E.: Ophthalmic Laser Interferometry. In: *Proc. SPIE 0658, Optical Instrumentation for Biomedical Laser Applications*, 1986, 48
- [75] FERCHER, A. F. ; MENGEDOHT, K. ; WERNER, W.: Eye-length measurement by interferometry with partially coherent light. In: *Optics Letters* 13 (1988), Nr. 3, S. 186. <http://dx.doi.org/10.1364/OL.13.000186>. – DOI 10.1364/OL.13.000186
- [76] FERCHER, A. F. ; HITZENBERGER, C. K.: Optical coherence tomography. In: *Progress in Optics* 44 (2002), S. 215–302. [http://dx.doi.org/10.1016/S0079-6638\(02\)80017-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0079-6638(02)80017-8). – DOI 10.1016/S0079-6638(02)80017-8
- [77] FERCHER, A. F. ; DREXLER, W. ; HITZENBERGER, C. K. ; LASSER, T.: Optical coherence tomography - principles and applications. In: *Reports on Progress in Physics* 66 (2003), Nr. 2, S. 239–303. <http://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/66/2/204>. – DOI 10.1088/0034-4885/66/2/204
- [78] LEITGEB, R. ; HITZENBERGER, C. ; FERCHER, A.: Performance of fourier domain vs. time domain optical coherence tomography. In: *Optics express* 11 (2003), Nr. 8, S. 889–94. <http://dx.doi.org/10.1364/OE.11.000889>. – DOI 10.1364/OE.11.000889
- [79] CHOMA, M. A. ; SARUNIC, M. V. ; YANG, C. ; IZATT, J.: Sensitivity advantage of swept source and Fourier domain optical coherence tomography. In: *Opt. Express* 11 (2003), Nr. 18, S. 2183–2189. <http://dx.doi.org/10.1364/OE.11.002183>. – DOI 10.1364/OE.11.002183
- [80] DUBOIS, A. ; GRIEVE, K. ; MONERON, G. ; LECAQUE, R. ; VABRE, L. ; BOCCARRA, C.: Ultrahigh-resolution full-field optical coherence tomography. In: *Applied Optics* 43 (2004), Nr. 14, S. 2874. <http://dx.doi.org/10.1364/AO.43.002874>. – DOI 10.1364/AO.43.002874
- [81] HEE, M. R. ; IZATT, J. A. ; SWANSON, E. A. ; HUANG, D. ; SCHUMAN, J. S. ; LIN, C. P. ; PULIAFITO, C. A. ; FUJIMOTO, J. G.: Optical coherence tomography of the human retina. In: *Archives of Ophthalmology* 113 (1995), Nr. 3, S. 325–332
- [82] STRICKLAND, D. ; MOUROU, G.: Compression of Amplified Chirped Optical Pulses. In: *Optics Communications* 55 (1985), Nr. 6, S. 447–449. [http://dx.doi.org/10.1016/0030-4018\(85\)90151-8](http://dx.doi.org/10.1016/0030-4018(85)90151-8). – DOI 10.1016/0030-4018(85)90151-8
- [83] MCPHERSON, A. ; GIBSON, G. ; JARA, H. ; JOHANN, U. ; LUK, T. S. ; MCINTYRE, I. A. ; BOYER, K. ; RHODES, C. K.: Studies of multiphoton production of vacuum-ultraviolet radiation in the rare gases. In: *Journal of the Optical Society of America B* 4 (1987), Nr. 4, S. 595. <http://dx.doi.org/10.1364/JOSAB.4.000595>. – DOI 10.1364/JOSAB.4.000595
- [84] L'HUILLIER, A. ; BALCOU, P.: High-order harmonic generation in rare gases with a 1-ps 1053-nm laser. In: *Physical Review Letters* 70 (1993), Nr. 6, S. 774–777. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.70.774>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.70.774
- [85] BRABEC, T. ; KRAUSZ, F.: Intense few-cycle laser fields: Frontiers of nonlinear optics. In: *Reviews of Modern Physics* 72 (2000), Nr. 2, S. 545–591. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.72.545>. – DOI 10.1103/RevModPhys.72.545

- [86] CORKUM, P. B.: Plasma perspective on strong field multiphoton ionization. In: *Physical Review Letters* 71 (1993), Nr. 13, S. 1994–1997. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.1994>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.71.1994
- [87] KRAUSE, J. L. ; SCHAFER, Kenneth J. ; KULANDER, K. C.: High-order harmonic generation from atoms and ions in the high intensity regime. In: *Physical Review Letters* 68 (1992), Nr. 24, S. 3535–3538. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.68.3535>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.68.3535
- [88] KELDysh, L. V.: Ionization in the field of a strong electromagnetic wave. In: *Soviet Physics JETP* 20 (1965), Nr. 5, S. 1307–1314. <http://dx.doi.org/10.1234/12345678>. – DOI 10.1234/12345678
- [89] AMMOSEV, M. V. ; DELONE, N. B. ; KRAINOV, V. P.: Tunnel ionization of complex atoms and of atomic ions in an alternating electromagnetic field. In: *Sov. Phys. JETP* 64 (1986), S. 1191–1194. <http://dx.doi.org/10.1117/12.938695>. – DOI 10.1117/12.938695
- [90] PAUL, P. M. ; TOMA, E. S. ; BREGER, P. ; MULLOT, G. ; AUGÉ, F. ; BALCOU, P. ; MULLER, H. G. ; AGOSTINI, P.: Observation of a train of attosecond pulses from high harmonic generation. In: *Science (New York, N.Y.)* 292 (2001), Nr. 5522, S. 1689–1692. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1059413>. – DOI 10.1126/science.1059413
- [91] SANSONE, G. ; BENEDETTI, E. ; CALEGARI, F. ; VOZZI, C. ; AVALDI, L. ; FLAMMINI, R. ; POLETTI, L. ; VILLORESI, P. ; ALTUCCI, C. ; VELOTTA, R. ; STAGIRA, S. ; DE SILVESTRI, S. ; NISOLI, M.: Isolated Single-Cycle Attosecond Pulses. In: *Science* 314 (2006), Nr. 5798, S. 443–446. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1132838>. – DOI 10.1126/science.1132838
- [92] SANSONE, G. ; POLETTI, L. ; NISOLI, M.: High-energy attosecond light sources. In: *Nature Photonics* 5 (2011), Nr. 11, S. 655–663. <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2011.167>. – DOI 10.1038/nphoton.2011.167
- [93] CHINI, M. ; ZHAO, K. ; CHANG, Z.: The generation, characterization and applications of broadband isolated attosecond pulses. In: *Nature Photonics* 8 (2014), Nr. 3, S. 178–186. <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2013.362>. – DOI 10.1038/nphoton.2013.362
- [94] LEWENSTEIN, M. ; BALCOU, Ph ; IVANOV, M. Y. ; L’HUIILLIER, Anne ; CORKUM, P. B.: Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields. In: *Physical Review A* 49 (1994), Nr. 3, S. 2117–2132. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.49.2117>. – DOI 10.1103/PhysRevA.49.2117
- [95] CONSTANT, E. ; GARZELLA, D. ; BREGER, P. ; MÉVEL, E. ; DORRER, Ch ; LE BLANC, C. ; SALIN, F. ; AGOSTINI, P.: Optimizing high harmonic generation in absorbing gases: Model and experiment. In: *Physical Review Letters* 82 (1999), Nr. 8, S. 1668–1671. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.1668>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.82.1668
- [96] DITMIRE, T. ; GUMBRELL, E. T. ; SMITH, R. A. ; TISCH, J. W. G. ; MEYERHOFER, D. D. ; HUTCHINSON, M. H. R.: Spatial Coherence Measurement of Soft X-Ray Radiation Produced by High Order Harmonic Generation. In: *Physical Review Letters* 77 (1996), Nr. 23, S. 4756–4759. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.4756>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.77.4756

- [97] BARTELS, R. A. ; PAUL, A. ; GREEN, H. ; KAPTEYN, H. C. ; MURNANE, M. M. ; BACKUS, S. ; CHRISTOV, I. P. ; LIU, Y. ; ATTWOOD, D. ; JACOBSEN, C.: Generation of spatially coherent light at extreme ultraviolet wavelengths. In: *Science* 297 (2002), Nr. 5580, S. 376–378. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1072191>. – DOI 10.1126/science.1072191
- [98] TAKAHASHI, E. ; NABEKAWA, Y. ; MIDORIKAWA, K.: Generation of 10- μ J coherent extreme-ultraviolet light by use of high-order harmonics. In: *Optics Letters* 27 (2002), Nr. 21, S. 1920. <http://dx.doi.org/10.1364/OL.27.001920>. – DOI 10.1364/OL.27.001920
- [99] POPMINTCHEV, T. ; CHEN, M.-C. ; BAHABAD, A. ; GERRITY, M. ; SIDORENKO, P. ; COHEN, O. ; CHRISTOV, I. P. ; MURNANE, M. M. ; KAPTEYN, H. C.: Phase matching of high harmonic generation in the soft and hard X-ray regions of the spectrum. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 106 (2009), Nr. 26, S. 10516–10521. <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.0903748106>. – DOI 10.1073/pnas.0903748106
- [100] HILBERT, V. ; BLINNE, A. ; FUCHS, S. ; FEIGL, T. ; KÄMPFER, T. ; RÖDEL, C. ; USCHMANN, I. ; WÜNSCHE, M. ; PAULUS, G. G. ; FÖRSTER, E. ; ZASTRAU, U.: An extreme ultraviolet Michelson interferometer for experiments at free-electron lasers. In: *Review of Scientific Instruments* 84 (2013), Nr. 9, S. 095111. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4821146>. – DOI 10.1063/1.4821146
- [101] VAKHTIN, A. B. ; KANE, D. J. ; WOOD, W. R. ; PETERSON, K. A.: Common-Path Interferometer for Frequency-Domain Optical Coherence Tomography. In: *Applied Optics* 42 (2003), Nr. 34, S. 6953. <http://dx.doi.org/10.1364/AO.42.006953>. – DOI 10.1364/AO.42.006953
- [102] LARSSON, C. U. S. ; BEUTLER, A. ; BJÖRNEHOLM, O. ; FEDERMANN, F. ; HAHN, U. ; RIECK, A. ; VERBIN, S. ; MÖLLER, T.: First results from the high resolution XUV undulator beamline BW3 at HASYLAB. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 337 (1994), Nr. 2-3, S. 603–608. [http://dx.doi.org/10.1016/0168-9002\(94\)91133-9](http://dx.doi.org/10.1016/0168-9002(94)91133-9). – DOI 10.1016/0168-9002(94)91133-9
- [103] JANSSON, P. A. C. ; VOGT, U. ; HERTZ, H. M.: Liquid-nitrogen-jet laser-plasma source for compact soft x-ray microscopy. In: *Review of Scientific Instruments* 76 (2005), Nr. 4. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1884186>. – DOI 10.1063/1.1884186
- [104] ROTHHARDT, J. ; HÄDRICH, S. ; DEMMLER, S. ; KREBS, M. ; FRITZSCHE, S. ; LIMPET, J. ; TÜNNERMANN, A.: Enhancing the macroscopic yield of narrow-band high-order harmonic generation by fano resonances. In: *Physical Review Letters* 112 (2014), Nr. 23, S. 1–5. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.233002>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.112.233002
- [105] LICHTERS, R. ; VEHN, J. Meyer-ter ; PUKHOV, A.: Short-pulse laser harmonics from oscillating plasma surfaces driven at relativistic intensity. In: *Physics of Plasmas* 3 (1996), Nr. 9, S. 3425–3437. <http://dx.doi.org/10.1063/1.871619>. – DOI 10.1063/1.871619
- [106] GIBBON, P.: Harmonic generation by femtosecond laser-solid interaction: A Coherent “water-window” light source? In: *Physical Review Letters* 76 (1996), Nr. 1, S. 50–53. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.50>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.76.50
- [107] RÖDEL, C. ; BRÜGGE, D. an d. ; BIERBACH, J. ; YEUNG, M. ; HAHN, T. ; DROMEY, B. ; HERZER, S. ; FUCHS, S. ; POUR, A. ; ECKNER, E. ; BEHMKE, M. ; CERCHEZ, M. ; JÄCKEL,

- O. ; HEMMERS, D. ; TONCIAN, T. ; KALUZA, M. ; BELYANIN, A. ; PRETZLER, G. ; WILLI, O. ; PUKHOV, A. ; ZEPF, M. ; PAULUS, G. G.: Harmonic Generation from Relativistic Plasma Surfaces in Ultrasteep Plasma Density Gradients. In: *Physical Review Letters* 109 (2012), Nr. 12, S. 1–5. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.125002>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.109.125002
- [108] BIEDERMANN, J.: *Erzeugung hoher Harmonischer in Gasen mit few-cycle Laserpulsen*, Jena, Bachelorarbeit, 2013
- [109] KHANARIAN, G. ; NORWOOD, R.: Optical Parametric Amplifier. In: *US Patent* (1991), Nr. US5064265A
- [110] AULL, S.: *Optimierung einer Harmonischen-Lichtquelle für die Kohärenztomographie im extremen ultravioletten Spektralbereich*, Jena, Bachelorarbeit, 2014
- [111] JASNY, J. ; TEUBNER, U. ; THEOBALD, W. ; WULKER, C. ; BERGMANN, J. ; SCHÄFER, F. P.: A Single-Shot Spectrograph For The Soft-X-Ray Region. In: *Review Of Scientific Instruments* 65 (1994), Nr. 5, S. 1631–1635
- [112] FUCHS, S. ; RÖDEL, C. ; KREBS, M. ; HÄDRICH, S. ; BIERBACH, J. ; PAZ, A. E. ; KUSCHEL, S. ; WÜNSCHE, M. ; HILBERT, V. ; ZASTRAU, U. ; FÖRSTER, E. ; LIMPET, J. ; PAULUS, G. G.: Sensitivity calibration of an imaging extreme ultraviolet spectrometer-detector system for determining the efficiency of broadband extreme ultraviolet sources. In: *The Review of scientific instruments* 84 (2013), Nr. 2, S. 023101. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4788732>. – DOI 10.1063/1.4788732
- [113] KRAUSE, A.: *XUV Kohärenztomographie mit einer Referenzfolie*, Jena, Bachelor-Arbeit, 2017
- [114] BIEDERMANN, J.: *Laser-Driven XUV Coherence Tomography*, Jena, Master-thesis, 2015
- [115] GERCHBERG, R. W. ; SAXTON, W. O.: Practical Algorithm for Determination of Phase From Image and Diffraction Plane Pictures. In: *Optik* 35 (1972), Nr. 2, S. 237
- [116] FIENUP, J. R.: Reconstruction of an object from the modulus of its Fourier transform. In: *Optics Letters* 3 (1978), Nr. 1, S. 27. <http://dx.doi.org/10.1364/OL.3.000027>. – DOI 10.1364/OL.3.000027
- [117] MARCHESINI, S.: A unified evaluation of iterative projection algorithms for phase retrieval. In: *Review of Scientific Instruments* 78 (2007), Nr. 1. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2403783>. – DOI 10.1063/1.2403783
- [118] MAIDEN, Andrew M. ; RODENBURG, John M.: An improved ptychographical phase retrieval algorithm for diffractive imaging. In: *Ultramicroscopy* 109 (2009), Nr. 10, S. 1256–1262. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ultramic.2009.05.012>. – DOI 10.1016/j.ultramic.2009.05.012
- [119] MARCHESINI, S. ; BOUTET, S. ; SAKDINAWAT, A. E. ; BOGAN, M. J. ; BAJT, S. ; BARTY, A. ; CHAPMAN, H. N. ; FRANK, M. ; HAU-RIEGE, S. P. ; SZÖKE, A. ; CUI, C. ; SHAPIRO, D. A. ; HOWELLS, M. R. ; SPENCE, J. C. H. ; SHAEVITZ, J. W. ; LEE, J. Y. ; HAJDU, J. ; SEIBERT, M. M.: Massively parallel X-ray holography. In: *Nature Photonics* 2 (2008), Nr. 9, S. 560–563. <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2008.154>. – DOI 10.1038/nphoton.2008.154

- [120] BEINERT, R. ; PLONKA, G.: Ambiguities in One-Dimensional Discrete Phase Retrieval from Fourier Magnitudes. In: *Journal of Fourier Analysis and Applications* 21 (2015), Nr. 6, S. 1169–1198. <http://dx.doi.org/10.1007/s00041-015-9405-2>. – DOI 10.1007/s00041-015-9405-2
- [121] LUCY, L B.: An iterative technique for the rectification of observed distributions. In: *The Astronomical Journal* 79 (1974), Nr. 6, S. 745. <http://dx.doi.org/10.1086/111605>. – DOI 10.1086/111605
- [122] RICHARDSON, W. H.: Bayesian-Based Iterative Method of Image Restoration*. In: *Journal of the Optical Society of America* 62 (1972), Nr. 1, S. 55. <http://dx.doi.org/10.1364/JOSA.62.000055>. – DOI 10.1364/JOSA.62.000055
- [123] SHECHTMAN, Y. ; BECK, A. ; ELDAR, Y. C.: GESPAR: Efficient phase retrieval of sparse signals. In: *IEEE Transactions on Signal Processing* 62 (2014), Nr. 4, S. 928–938. <http://dx.doi.org/10.1109/TSP.2013.2297687>. – DOI 10.1109/TSP.2013.2297687
- [124] ABEL, J. J.: *XUV Kohärenztomografie - Auf dem Weg zur dreidimensionalen Nanoskopie*, Jena, Masterarbeit, 2016
- [125] MORITA, M. ; OHMI, T. ; HASEGAWA, E. ; KAWAKAMI, M. ; OHWADA, M.: Growth of native oxide on a silicon surface. In: *Journal of Applied Physics* 68 (1990), Nr. 3, S. 1272–1281. <http://dx.doi.org/10.1063/1.347181>. – DOI 10.1063/1.347181
- [126] WÜNSCHE, M. ; FUCHS, S. ; NATHANAEL, J. ; WEBER, T. ; ABEL, J. J. ; REINHARD, J. ; WIESNER, F. ; SKRUSZEWICZ, S. ; RÖDEL, C. ; PAULUS, G. G.: Versatile and modular spectrometer for XUV and soft X-ray radiation. In: *wird demnächst eingereicht* (2018)
- [127] ARTIOUKOV, I. A. ; KRYMSKI, K. M.: Schwarzschild objective for soft x-rays. In: *Opt. Eng.* 39 (2000), Nr. 8, S. 1–8. <http://dx.doi.org/10.1117/1.1303727>. – DOI 10.1117/1.1303727
- [128] REINHARD, J.: *XUV-Mikroskopie mit einem Schwarzschild-Objektiv*, Jena, Masterarbeit, 2018
- [129] STÖHR, J.: *Springer Series in Surface Sciences*. Bd. 25: *NEXAFS Spectroscopy*. Berlin, Heidelberg, 1992
- [130] WACHULAK, P. ; BARTNIK, A. ; FIEDOROWICZ, H.: Optical coherence tomography (OCT) with 2 nm axial resolution using a compact laser plasma soft X-ray source. In: *Scientific Reports* 8 (2018), Nr. 8494, S. 1–8. <http://dx.doi.org/10.1038/s41598-018-26909-0>. – DOI 10.1038/s41598-018-26909-0
- [131] *Wiener-Khinchin-theorem*. <http://www.physics.ohio-state.edu/~jay/846/noiseho.pdf>

A Rechnungen und Beweise

A.1 Interferenzterm im Michelson-Interferometer

Für den Interferenzterm $\Gamma_z(z_1, z_2)$ in Gleichung 3.51 ergibt sich mit dem Faltungssatz⁴³, der rechteckigen Fensterfunktion $\Pi_T(t)$ ⁴⁴ und der beschränkten Fourier-Transformation $E_T(\omega)$ ⁴⁵

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{12}(z_1, z_2; n_1, n_2) &= \langle \mathcal{E}_1^*(2z_1, t) \mathcal{E}_2(2z_2, t) \rangle_t = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \mathcal{E}_1^*(2z_1, t) \mathcal{E}_2(2z_2, t) dt \\
 &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-\infty}^{\infty} \Pi_T(t) \mathcal{E}_1^*(2z_1, t) \Pi_T(t) \mathcal{E}_2(2z_2, t) dt \\
 &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{FT}^{-1} [E_{T1}^*(2z_1, -\omega)] \mathcal{FT}^{-1} [E_{T2}(2z_2, \omega)] dt \\
 &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{FT}^{-1} [E_{T1}^*(2z_1, -\omega) * E_{T2}(2z_2, \omega)] dt \\
 &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} E_{T1}^*(2z_1, -\omega') E_{T2}(2z_2, \omega - \omega') d\omega' e^{-i\omega t} d\omega dt \\
 &= 2\pi \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} E_{T1}^*(2z_1, -\omega') E_{T2}(2z_2, \omega - \omega') \delta(\omega) d\omega' d\omega \\
 &= 2\pi \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-\infty}^{\infty} E_{T1}^*(2z_1, \omega) E_{T2}(2z_2, \omega) d\omega \\
 &= 2\pi \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-\infty}^{\infty} E_{T0}^*(\omega) E_{T0}(\omega) e^{i2[k_2(\omega)z_2 - k_1(\omega)z_1]} d\omega \\
 &= 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} |E_{T0}(\omega)|^2 e^{i2[k_2(\omega)z_2 - k_1(\omega)z_1]} d\omega \\
 &= \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega) e^{i2[k_2(\omega)z_2 - k_1(\omega)z_1]} d\omega. \tag{A.1}
 \end{aligned}$$

Dabei ist $S_0(\omega)$ das Spektrum des einfallenden Lichtes. Die für die ursprüngliche Definition des Spektrums (Gl. 3.47) fehlende Mittelung ist durch die Festlegung auf den zeitlichen Mittelwert nicht relevant, da die Fourierkomponenten im Frequenzraum zeitinvariant sind.

⁴³ $f(x) * g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') \cdot g(x - x') dx'$

⁴⁴ $\Pi_T(t) = \begin{cases} 1 & \text{for } -T \leq t \leq T \\ 0 & \text{else} \end{cases}$

⁴⁵ $E_T(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-T}^T \mathcal{E}(t) e^{i\omega t} dt$

A.2 Zeitliche Autokorrelationsfunktion am Ausgang eines Michelson-Interferometers

$$\begin{aligned}
\Gamma_A(\tau) &= \langle [\mathcal{E}_1^*(2z_1, t) + \mathcal{E}_2^*(2z_2, t)] \cdot [\mathcal{E}_1(2z_1, t + \tau) + \mathcal{E}_2(2z_2, t + \tau)] \rangle \\
&= \frac{2}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_A(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega = \frac{1}{2} \Gamma(\tau) + \frac{1}{\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega) \cos[\kappa(\omega)\Delta z] e^{-i\omega\tau} d\omega \\
&= \frac{1}{2} \Gamma(\tau) + \frac{1}{2\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega) e^{i\kappa(\omega)\Delta z} e^{-i\omega\tau} d\omega + \frac{1}{2\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega) e^{-i\kappa(\omega)\Delta z} e^{-i\omega\tau} d\omega \\
&= \frac{1}{2} \Gamma(\tau) + \frac{1}{2\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega) e^{i\omega \left. \frac{d\kappa}{d\omega} \right|_{\omega_0} \Delta z} e^{i\mathcal{O}_{\omega_0}(\omega)\Delta z} e^{-i\omega\tau} d\omega \\
&\quad + \frac{1}{2\varepsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} S_0(\omega) e^{-i\omega \left. \frac{d\kappa}{d\omega} \right|_{\omega_0} \Delta z} e^{-i\mathcal{O}_{\omega_0}(\omega)\Delta z} e^{-i\omega\tau} d\omega \\
&= \frac{1}{2} \Gamma(\tau) + \frac{1}{8\pi} \Gamma(\tau) * \delta \left(\tau - \left. \frac{d\kappa}{d\omega} \right|_{\omega_0} \Delta z \right) * \mathcal{FT}_{\omega, \tau}^{-1} [e^{i\mathcal{O}_{\omega_0}(\omega)\Delta z}] \\
&\quad + \frac{1}{8\pi} \Gamma(\tau) * \delta \left(\tau + \left. \frac{d\kappa}{d\omega} \right|_{\omega_0} \Delta z \right) * \mathcal{FT}_{\omega, \tau}^{-1} [e^{-i\mathcal{O}_{\omega_0}(\omega)\Delta z}] \\
&= \frac{1}{2} \Gamma(\tau) + \frac{1}{8\pi} \Gamma \left(\tau - \left. \frac{d\kappa}{d\omega} \right|_{\omega_0} \Delta z \right) * \mathcal{FT}_{\omega, \tau}^{-1} [e^{i\mathcal{O}_{\omega_0}(\omega)\Delta z}] \\
&\quad + \frac{1}{8\pi} \Gamma \left(\tau + \left. \frac{d\kappa}{d\omega} \right|_{\omega_0} \Delta z \right) * \mathcal{FT}_{\omega, \tau}^{-1} [e^{-i\mathcal{O}_{\omega_0}(\omega)\Delta z}]. \tag{A.2}
\end{aligned}$$

Dabei ist

$$\kappa(\omega) = \kappa(\omega_0) + \left. \frac{d\kappa}{d\omega} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\kappa}{d\omega^2} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0)^2 + \dots = \left. \frac{d\kappa}{d\omega} \right|_{\omega_0} \omega + \mathcal{O}_{\omega_0}(\omega) \tag{A.3}$$

die Taylorentwicklung der Dispersionsrelation.

A.3 Realteil des k -Vektors bei schrägem Einfall

Für die verallgemeinerten Fresnel'schen Formeln (siehe 3.1.3) wurde angenommen, dass die eingehende Welle aus dem Cladding homogen ist. Daher sind im Cladding die Phasenfronten und die Fronten gleicher Amplitude parallel. Nach der Brechung in das Schichtsystem sind die Wellen durch die komplexe Brechzahl im Allgemeinen inhomogen. Unter der naheliegenden Annahme, dass das Cladding die Brechzahl 1 (Vakuum) besitzt, ergibt sich

mit Formel 3.28 die z -Komponente des k -Vektors in der j -ten Schicht

$$\begin{aligned}
 k_{jz} &= k_0 n_j \sqrt{1 - \frac{\cos^2(\varphi)}{n_j^2}} \\
 &= k_0 n_j \underbrace{\sqrt{1 - \cos^2(\varphi) \frac{n_j'^2 - n_j''^2}{(n_j'^2 + n_j''^2)^2} + i \cos^2(\varphi) \frac{2n_j' n_j''}{(n_j'^2 + n_j''^2)^2}}}_{qe^{i\gamma}} = k_0 n_j q (\cos \gamma + i \sin \gamma).
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

Dabei ist φ wieder der Einfallswinkel zur Oberfläche gemessen. Für den Real- und Imaginärteil von k_{jz} ergibt sich dann:

$$k'_{jz} = k_0 n_j' q \cos \gamma - k_0 n_j'' q \sin \gamma = \frac{\kappa_j}{2} \tag{A.5}$$

$$k''_{jz} = k_0 n_j' q \sin \gamma - k_0 n_j'' q \cos \gamma \tag{A.6}$$

mit

$$q = \left[1 - 2 \cos^2(\varphi) \frac{n_j'^2 - n_j''^2}{(n_j'^2 + n_j''^2)^2} + \cos^4(\varphi) \frac{(n_j'^2 - n_j''^2)^2}{(n_j'^2 + n_j''^2)^4} + \cos^4(\varphi) \frac{4n_j'^2 n_j''^2}{(n_j'^2 + n_j''^2)^4} \right]^{\frac{1}{4}} \tag{A.7}$$

$$\gamma = \frac{1}{2} \arctan \left[\frac{2n_j' n_j''}{\frac{(n_j'^2 + n_j''^2)^2}{\cos^2 \varphi} - (n_j'^2 - n_j''^2)} \right]. \tag{A.8}$$

A.4 Beweis Wiener-Kchinchin Theorem

Sei $\Gamma(\tau)$ die Autokorrelationsfunktion eines stationären Feldes $\mathcal{E}(t)$.

$$\Gamma(\tau) = \langle \mathcal{E}^*(t) \mathcal{E}(t + \tau) \rangle \tag{A.9}$$

Erfülle $\Gamma(\tau)$ ferner die Dirichlet Bedingung und sei damit absolut integrierbar, so dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Gamma(\tau)| \, d\tau \tag{A.10}$$

konvergiert und die Fourier-Transformation

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(\tau) e^{i\omega\tau} \, d\tau \tag{A.11}$$

existiert. Sei $E(\omega)$ die beschränkte Fourier-Transformation des Feldes.

$$E_T(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-T/2}^{T/2} \mathcal{E}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (\text{A.12})$$

Die Zugehörige spektrale Intensitätsdichte des beschränkten Zeitbereiches ist

$$S_T(\omega) = \pi \varepsilon_0 n c \left\langle \frac{1}{T} |E_T(\omega)|^2 \right\rangle \quad (\text{A.13})$$

und die gesamte spektrale Intensitätsdichte der existierende Grenzwert

$$S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} S_T(\omega). \quad (\text{A.14})$$

Wiener-Khinchin-Theorem:

$$S(\omega) = \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (\text{A.15})$$

Beweis (nach [131]): Es ist

$$\begin{aligned} \langle |E_T(\omega)|^2 \rangle &= \frac{1}{4\pi^2} \left\langle \left| \int_{-T/2}^{T/2} \mathcal{E}(t) e^{i\omega t} dt \right|^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \left\langle \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \mathcal{E}(t) \mathcal{E}^*(\tau) e^{i\omega(t-\tau)} dt d\tau \right\rangle \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \langle \mathcal{E}(t) \mathcal{E}^*(\tau) \rangle e^{i\omega(t-\tau)} dt d\tau \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \Gamma(t-\tau) e^{i\omega(t-\tau)} dt d\tau. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Weiterhin gilt

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} f(t-\tau) dt d\tau = \int_{-T}^T (T-|\tau|) f(\tau) d\tau \quad (\text{A.17})$$

und damit

$$S_T(\omega) = \pi \varepsilon_0 n c \left\langle \frac{1}{T} |E_T(\omega)|^2 \right\rangle = \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \int_{-T}^T \left(1 - \frac{|\tau|}{T}\right) \Gamma(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau = \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_T(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (\text{A.18})$$

mit der Definition

$$\Gamma_T(\tau) = \begin{cases} \left(1 - \frac{|\tau|}{T}\right) \Gamma(\tau) & |\tau| < T \\ 0 & |\tau| \geq T \end{cases}. \quad (\text{A.19})$$

Um das Integral zu lösen und umzuformen wird hier der Satz von Lebesgue verwendet.

Satz von Lebesque: Sei $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ ein Maßraum und sei (f_n) eine Folge von \mathcal{A} -messbaren Funktionen $f_n : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$.

Die Folge (f_n) konvergiere μ -fast überall gegen eine \mathcal{A} -messbare Funktion f . Ferner werde die Folge (f_n) von einer μ -integrierbaren Funktion g auf Ω majorisiert, sprich für alle $n \in \mathbb{N}$ gelte $|f_n| \leq g$ μ -fast überall. Es ist zu beachten, dass bei dieser Definition von Integrierbarkeit der Wert ∞ ausgeschlossen ist, das heißt $\int_{\Omega} |g| d\mu < \infty$.

Dann sind f und alle f_n μ -integrierbar und es gilt:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} f_n d\mu = \int_{\Omega} f d\mu \quad \text{sowie} \quad (\text{A.20})$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} |f_n - f| d\mu = 0. \quad (\text{A.21})$$

Betrachtet man die f_n als die komplexwertigen Funktionen $\Gamma_T(\tau) e^{i\omega\tau}$, dann ist der zugehörige Grenzwert $f = \Gamma(\tau) e^{i\omega\tau}$. Des weiteren kann die Funktion $g = |\Gamma(\tau)|$ gesetzt werden. Mit Gleichung A.19 gilt dann offensichtlich

$$|\Gamma_T(\tau) e^{i\omega\tau}| \leq |\Gamma(\tau)| \quad (\text{A.22})$$

und die Bedingungen für die Gültigkeit des Satzes von Lebesque sind erfüllt. Damit ist

$$\begin{aligned} S(\omega) &= \pi \varepsilon_0 n c \lim_{T \rightarrow \infty} \left\langle \frac{1}{T} |E_T(\omega)|^2 \right\rangle = \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_T(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \\ &= \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{T \rightarrow \infty} \Gamma_T(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \\ &= \frac{\varepsilon_0 n c}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad \blacksquare \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

B Zusätzliche Abbildungen

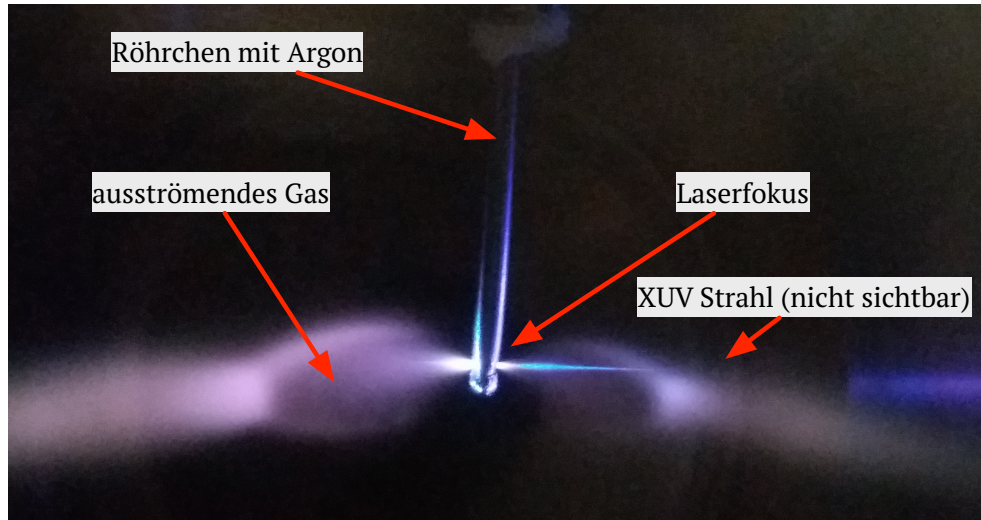


Abbildung B.1: Foto der Interaktion des Lasers mit Argon zur Erzeugung von XUV-Strahlung: Die infrarote Laserstrahlung wird auf ein mit Argon gefülltes Nickelröhrchen fokussiert. Dabei entsteht neben der gewünschten XUV-Strahlung auch sichtbares Licht, welches im Foto zu sehen ist. Der Laser bohrt ein Loch in das ursprünglich geschlossene Röhrchen. Der Lochquerschnitt und somit die Menge an ausströmendem Gas kann dadurch minimal gehalten werden.

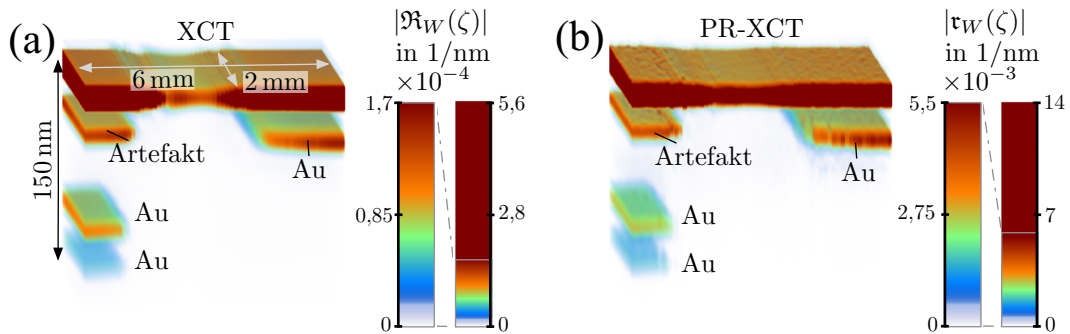


Abbildung B.2: Dreidimensionale PR-XCT Rekonstruktion von synchrotronbasierten Daten ohne Spektrometer-Entfaltung: Es wurde versucht, das am Synchrotron bei Photonenenergien von 35 eV – 98 eV aufgenommene Tomogramm (siehe Abb. 4.3) ($61 \times 21 = 1281$) direkt mit dem PR-XCT-Algorithmus zu rekonstruieren. (a) (Schrägsicht) zeigt das ursprüngliche XCT-Signal mit den intrinsischen Artefakten. Der PR-XCT-Algorithmus wurde unabhängig auf jeden lateralen Punkt angewendet (Schritt 1: 8×300 Iter. mit HIO $\nu = 0,5$, Schritt 2: 100 Iter., Schritt 3: 3×500 Iter. mit GS, $\zeta_{\max} - \zeta_{\min} = 180 \text{ nm}$). Das Rekonstruktionsergebnis ist in (b) dargestellt. Das Artefakt konnte nicht beseitigt werden. Der Algorithmus konvergiert nicht zur richtigen Lösung. Die axiale Auflösung beträgt 17 nm.

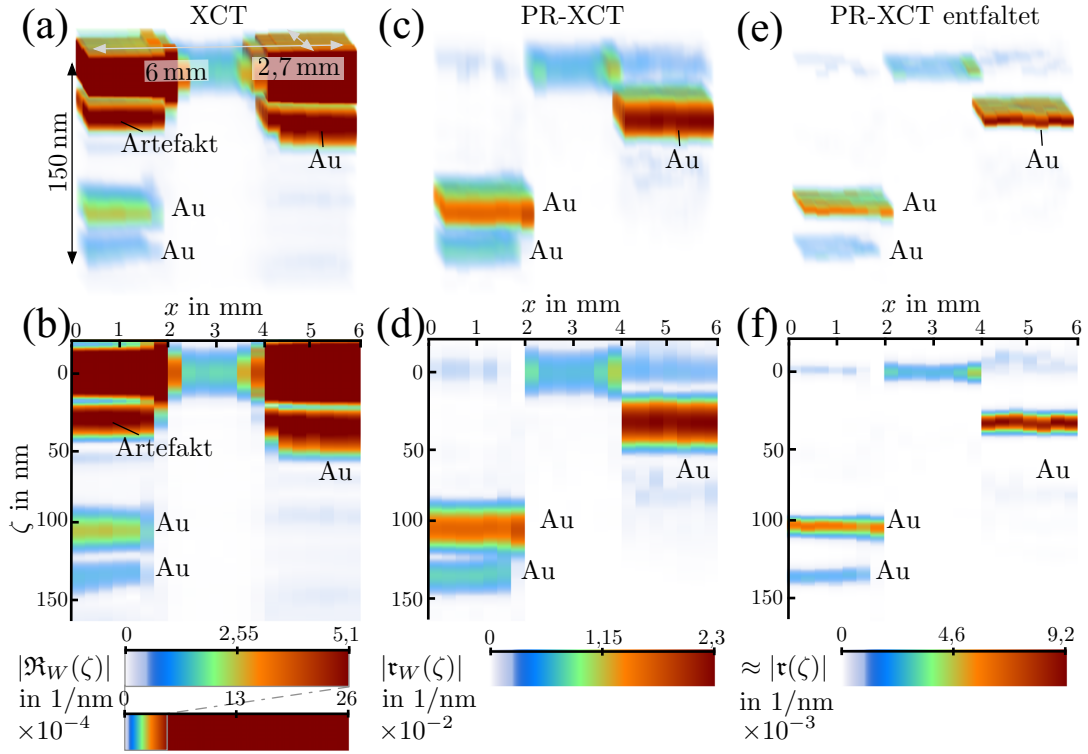


Abbildung B.3: Dreidimensionale PR-XCT Rekonstruktion von laserbasierten Daten: Die Reflektivität aller lateralen Punkte ($21 \times 4 = 84$) des an der HHG-Quelle bei Photonenenergien von 35 eV – 71 eV aufgenommenen Tomogramms (siehe Abb. 5.4) wurden mit einer Spektrometer-PSF ($\Delta_{\text{PSF}} = 0,41$ eV) entfaltet. (a) (Schrägsicht) und (b) (gewichtete Projektion) zeigen das ursprüngliche XCT-Signal mit den intrinsischen Artefakten. Der PR-XCT-Algorithmus wurde unabhängig auf jeden lateralen Punkt angewendet (Schritt 1: 5×300 Iter. mit HIO $\nu = 0,5$, Schritt 2: 100 Iter., Schritt 3: 3×500 Iter. mit GS, $\zeta_{\text{max}} - \zeta_{\text{min}} = 180$ nm). Das Rekonstruktionsergebnis ist in (c) bzw. (d) dargestellt. In (e) bzw. (f) wurde die Fenster-Response mit LR-Algorithmus (10 Iter.) entfaltet. Die Oberfläche wurde für die Darstellung punktwise manuell auf $\zeta = 0$ nm gelegt. Die Artefakte können auch hier beinahe komplett beseitigt werden. Die axiale Auflösung beträgt 28 nm.

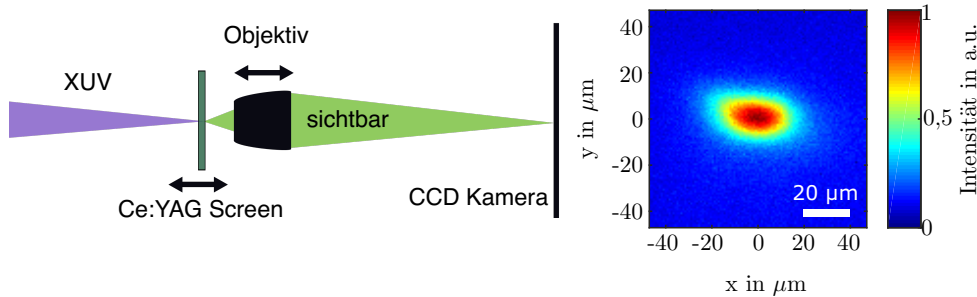


Abbildung B.4: Diagnose des XUV-Fokus: Der XUV-Fokus der lasergetriebenen XCT wurde mit Hilfe eines Ce:YAG Schirms und eines Mikroskopobjektivs vermessen. Der Schirm wandelt XUV-Strahlung in sichtbares Licht um, welches auf eine CCD-Kamera abgebildet wird (linke Skizze). Rechts ist der gemessene XUV-Fokus abgebildet. Sein Durchmesser beträgt 23 μm , was genau der lateralen Auflösung aus Abb. 6.13 entspricht.

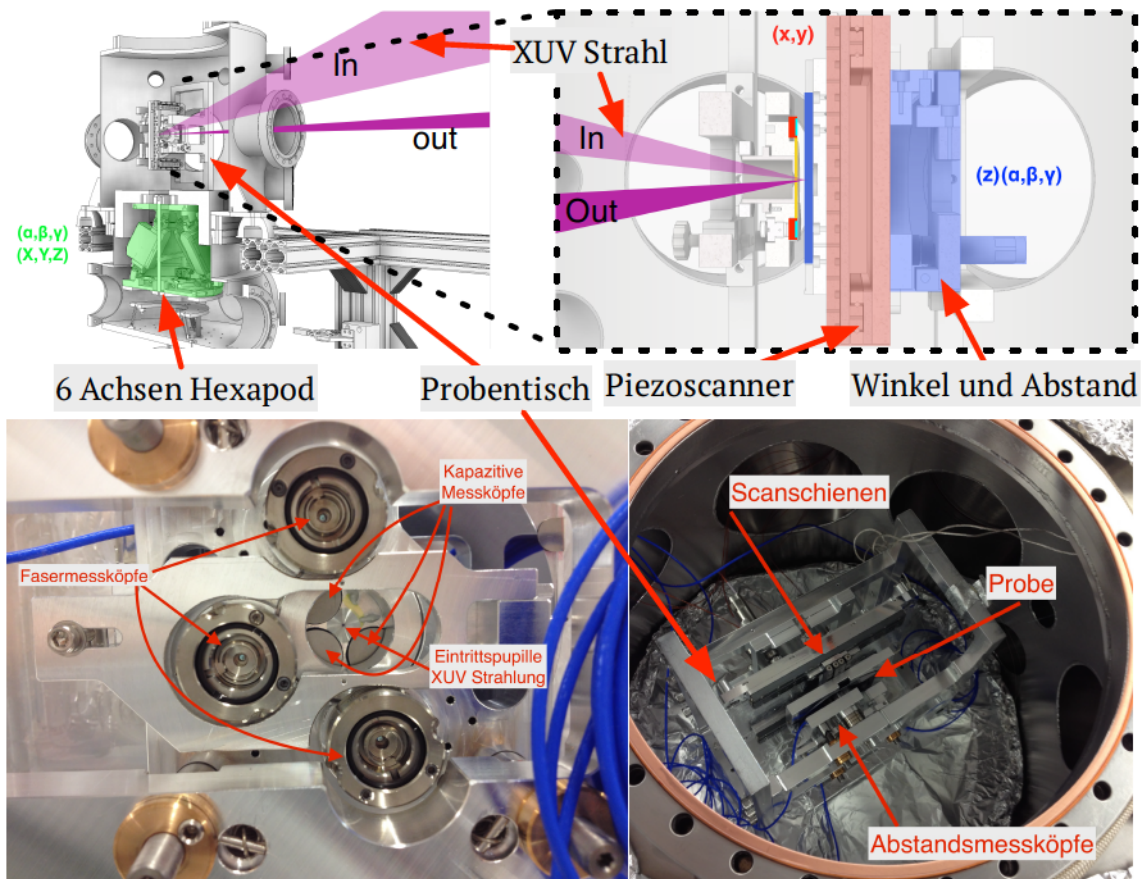


Abbildung B.5: Proben- und Membranhalter in der Messkammer: Oben links ist ein Schnitt durch die Messkammer gezeigt. Der gesamte Probentisch mitsamt Referenzmembranhalter und den Verstellmechaniken ist auf einem 6-Achsen Hexapod gehalten. Dies ermöglicht die notwendige präzise Ausrichtung der Probe auf die einfallende XUV-Strahlung und das Spektrometer. Oben rechts ist der Probentisch im Detail zu erkennen. Die Probe kann mit Hilfe eines xy-Piezoverstellers mit Nanometergenauigkeit abgerastert werden. Drei Piezomotoren können dazu verwendet werden, den Winkel und den Abstand der Probe zur Membran zu ändern. Die Position der Piezomotoren wird durch jeweils einen kapazitiven und einen optischen Sensor aktiv auf wenige Nanometer stabilisiert. Die Sensoren sind unten links abgebildet. Man blickt aus Richtung der einfallenden XUV-Strahlung von vorne auf den Probentisch. Unten rechts in der Abbildung befindet sich ein Foto des kompletten Probentisches in der Messkammer.

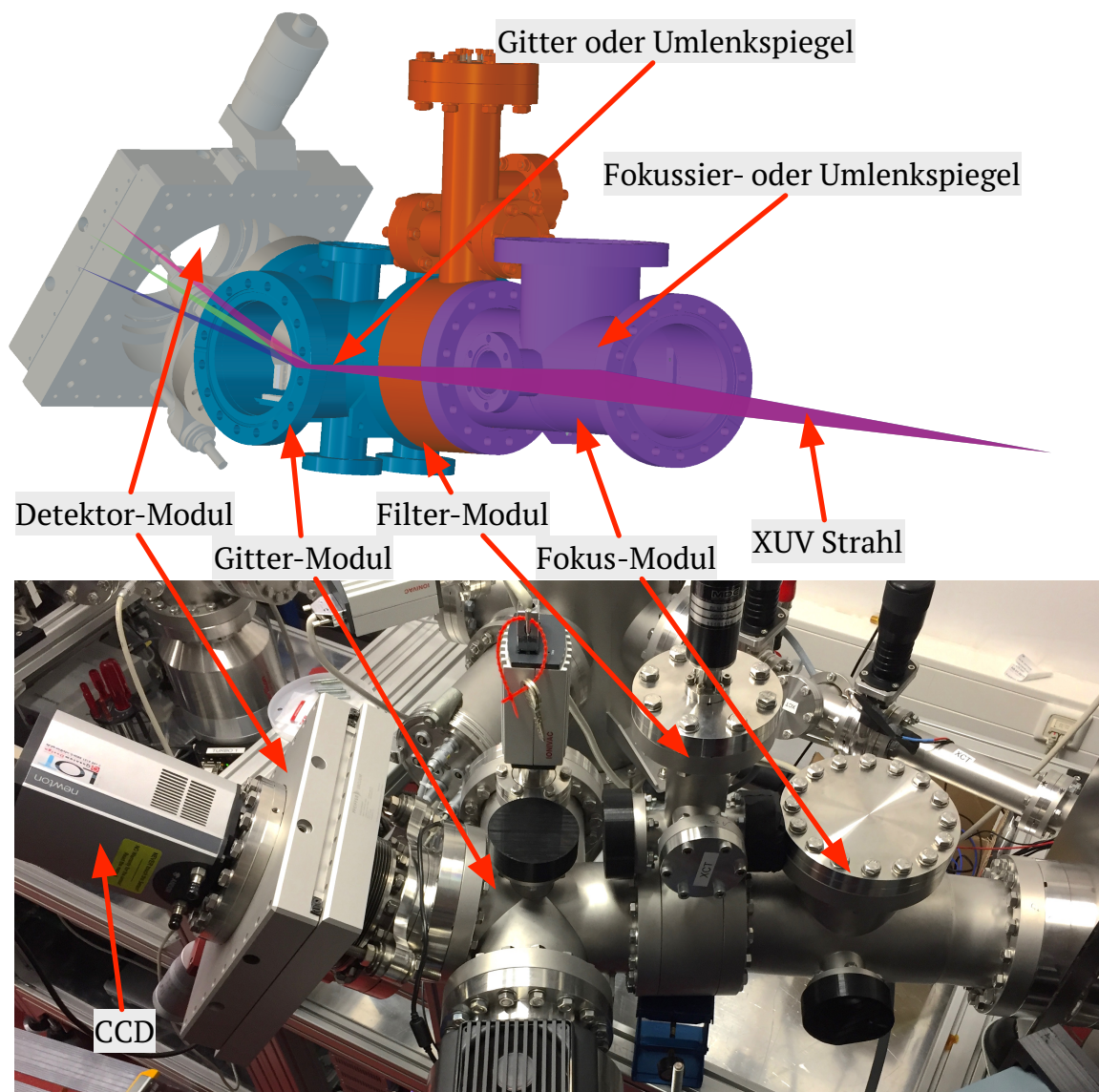


Abbildung B.6: XUV-Spektrometer: Das neu entwickelte XUV-Spektrometer besteht aus 5 Modulen (4 sind gezeigt). Das Fokus-Modul sammelt die XUV-Strahlung und fokussiert sie in der nicht-dispersiven Ebene des Spektrometers auf den Detektor. Der Fokussierspiegel kann während der Messung durch einen Umlenkspiegel ersetzt werden, damit die Divergenz der XUV-Strahlung detektiert werden kann. Das Filtermodul ermöglicht das schnelle Wechseln verschiedener Filterfolien zur Unterdrückung von sichtbarem Restlicht. Das Gittermodul enthält wahlweise ein Dispersionsgitter oder einen (unter Vakuum wechselbaren) Umlenkspiegel. So kann entweder das Spektrum oder der komplette XUV-Strahl untersucht werden. Das Detektor-Modul kann in verschiedenen Winkeln angebracht werden und ermöglicht so eine präzise Justage des Winkels und des Abstandes. Zusätzlich kann der Detektor in der dispersiven Ebene verfahren werden, um so den detektierbaren Spektralbereich zu vergrößern. Alle wesentlichen Achsen können mit UHV-tauglichen Piezoverstellern justiert werden. Das fünfte nicht gezeigte Modul ist das AR-Modul, welches durch zwei beschichtete Spiegel die Laserstrahlung von der XUV-Strahlung trennt. Es ist im XCT-Mikroskop direkt hinter der HHG-Kammer verbaut.

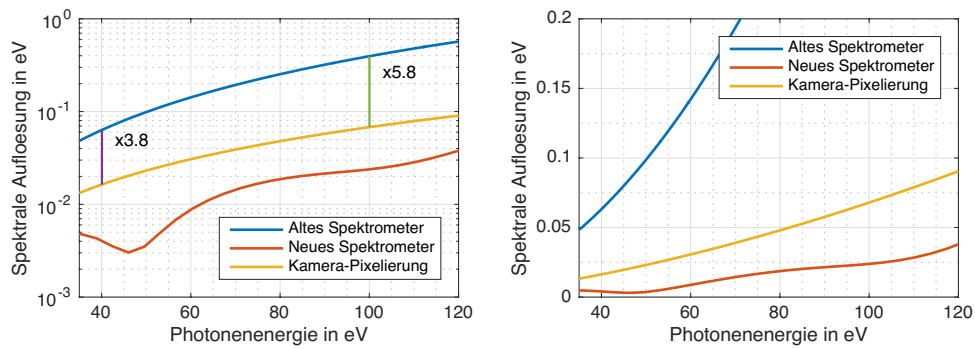


Abbildung B.7: Theoretische Auflösung des neuen Spektrometers: Der linke Graph zeigt die Auflösung in eV über der Photonenergie in logarithmischer Darstellung, während die rechte Abbildung linear skaliert ist. Die blauen Kurven zeigen die Auflösung des zuvor genutzten Jasny-Spektrometers [111] mit Transmissionsgitter. Die rote Kurve stellt die Auflösung des neuen Spektrometers dar. Die gelbe Kurve zeigt die Auflösung, die durch die Pixelgröße des verwendeten CCD-Detektors beschränkt ist. Das neue Spektrometer ist um ein Vielfaches leistungstärker als das vorherige. Es nutzt die Pixelgröße des CCD-Detektors voll aus und verbessert die mögliche spektrale Auflösung (und damit die maximale Eindringtiefe von XCT) um den Faktor 4-6.

Abbildungsverzeichnis

3.1	Prinzipieller Aufbau eines OCT-Gerätes	25
3.2	Realteil eines simulierten Signals einer FD-OCT-Messung	29
3.3	Simuliertes Signal einer TD-OCT Messung	31
3.4	Hohe Harmonische und 3-Stufen-Modell	35
4.1	Schematische Darstellung der Realisierung von OCT im XUV-Bereich: . .	41
4.2	Simuliertes XCT-Signal einer Probe mit zwei vergrabenen Schichten . . .	50
4.3	Dreidimensionale XCT-Messung am Synchrotron	53
5.1	Darstellung der speziell für XCT angepassten Laserquelle	57
5.2	Typisches XUV-Spektrum der HHG-Quelle	58
5.3	Struktur des laserbasierten XCT-Aufbaus	58
5.4	Dreidimensionale XCT-Messung an laserbasierter Quelle	59
5.5	XUV-Transmission durch verschiedene Materialien	60
5.6	Vergleich zwischen synchrotronbasierten und laserbasierten XCT-Messungen	61
6.1	Simulierte komplexe Feld-Reflektivität einer Probe mit zwei vergrabenen Schichten	65
6.2	Erster Schritt des PR-XCT Algorithmus	69
6.3	Symmetrisierte Reflektivität und Ergebnis des ersten Schrittes von PR-XCT	70
6.4	Zweiter Schritt des PR-XCT Algorithmus	71
6.5	Dritter Schritt des PR-XCT Algorithmus:	72
6.6	Rekonstruktion einer simulierten Probe mit dem PR-XCT-Algorithmus .	73
6.7	Entfaltung der gemessenen Reflektivität mit der PSF des Spektrometers .	77
6.8	Dreidimensionale PR-XCT-Rekonstruktion von synchrotronbasierten Daten	78
6.9	Vergleich des PR-XCT-Algorithmus mit synchrotronbasierten und laserba- sierten Messungen	80
6.10	Dreidimensional strukturierte siliziumbasierte Probe	81
6.11	Laserbasierte dreidimensionale PR-XCT	82
6.12	Raster- und Transmissionselektronenmikroskopaufnahme der XCT-Probe	83
6.13	Bestimmung der lateralen Auflösung der laserbasierten XCT-Messung . .	85
7.1	Skizze und Foto des fertiggestellten laserbasierten XCT-Mikroskops . . .	87

7.2	Laserbasierte dreidimensionale PR-XCT mit fertiggestelltem XCT-Mikroskop	90
B.1	Foto der Interaktion des Lasers mit Argon zur Erzeugung von XUV-Strahlung	117
B.2	Dreidimensionale PR-XCT Rekonstruktion von synchrotronbasierten Daten ohne Spektrometer-Entfaltung	117
B.3	Dreidimensionale PR-XCT-Rekonstruktion von laserbasierten Daten . . .	118
B.4	Diagnose des XUV-Fokus	118
B.5	Proben- und Membranhalter in der Messkammer	119
B.6	XUV-Spektrometer	120
B.7	Theoretische Auflösung des neuen Spektrometers	121

Eigene Publikationen

Veröffentlichungen

1. C. Rödel, D. an der Brügge, J. Bierbach, M. Yeung, T. Hahn, B. Dromey, S. Herzer, S. Fuchs, A. Pour, E. Eckner, M. Behmke, M. Cerchez, O. Jäckel, D. Hemmers, T. Toncian, M. Kaluza, A. Belyanin, G. Pretzler, O. Willi, A. Pukhov, M. Zepf, G. G. Paulus, „Harmonic Generation from Relativistic Plasma Surfaces in Ultrasteep Plasma Density Gradients“, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, Nr. 12, S. 1-5, (2012).
2. S. Fuchs, A. Blinne, C. Rödel, U. Zastra, V. Hilbert, M. Wünsche, J. Bierbach, E. Frumker, E. Förster, G. G. Paulus, „Optical coherence tomography using broadband XUV and soft X-ray radiation“, *Appl. Phys. B*, vol. 106, Nr. 4, S. 789-795, (2012).
3. J. Bierbach, C. Rödel, M. Yeung, B. Dromey, T. Hahn, A. Pour Galestian, S. Fuchs, A. E. Paz, S. Herzer, S. Kuschel, O. Jäckel, M. C. Kaluza, G. Pretzler, M. Zepf, G. G. Paulus, „Generation of 10 μ W relativistic surface high-harmonic radiation at a repetition rate of 10 Hz“, *New J. Phys.*, vol. 14, Nr. 6, S. 065005, (2012).
4. S. Fuchs, C. Rödel, M. Krebs, S. Hädrich, J. Bierbach, A. E. Paz, S. Kuschel, M. Wünsche, V. Hilbert, U. Zastra, E. Förster, J. Limpert, G. G. Paulus, „Sensitivity calibration of an imaging extreme ultraviolet spectrometer-detector system for determining the efficiency of broadband extreme ultraviolet sources“, *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 84, Nr. 2, S. 023101, (2013).
5. V. Hilbert, A. Blinne, S. Fuchs, T. Feigl, T. Kämpfer, C. Rödel, I. Uschmann, M. Wünsche, G. G. Paulus, E. Förster, U. Zastra, „An extreme ultraviolet Michelson interferometer for experiments at free-electron lasers“, *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 84, Nr. 9, S. 095111, (2013).
6. T. Hahn, J. Bierbach, C. Rödel, D. Hemmers, M. Yeung, B. Dromey, S. Fuchs, A. Galestian, S. Kuschel, M. Zepf, G. G. Paulus, G. Pretzler, „Broadband xuv polarimetry of high harmonics from plasma surfaces using multiple fresnel reflections“, *Appl. Phys. B Lasers Opt.*, vol. 118, Nr. 2, (2015).
7. S. Fuchs, C. Rödel, A. Blinne, U. Zastra, M. Wünsche, V. Hilbert, L. Glaser, J. Viehhaus, E. Frumker, P. Corkum, E. Förster, G. G. Paulus, „Nanometer resolution optical coherence tomography using broad bandwidth XUV and soft x-ray radiation“, *Sci. Rep.*, vol. 6, S. 20658, (2016).

8. M. Wünsche, S. Fuchs, S. Aull, J. Nathanael, M. Möller, C. Rödel, and G. G. Paulus, „Quasi-supercontinuum source in the extreme ultraviolet using multiple frequency combs from high-harmonic generation,“ *Opt. Express*, vol. 25, Nr. 6, S. 6936, (2017).
9. S. Fuchs, M. Wünsche, J. Nathanael, J. J. Abel, C. Rödel, J. Biedermann, J. Reinhard, U. Hübner, G. G. Paulus, „Optical coherence tomography with nanoscale axial resolution using a laser-driven high-harmonic source,“ *Optica*, vol. 4, Nr. 8, S. 903, (2017).

wissenschaftliche Vorträge

1. „Optical Coherence Tomography using broad-bandwidth XUV and soft X-ray radiation,“ *CLEO-Conference*, San Jose, USA (2012).
2. „XUV Coherence Tomography - XCT,“ *International Workshop on Physics of High Energy Density*, Hirschegg, Österreich (2012).
3. „Relativistic Frequency Synthesis of Light Fields,“ *International Workshop on Physics of High Energy Density*, Hirschegg, Österreich (2014).
4. „Towards extreme ultra violet coherence tomography with high harmonic generation light sources,“ *HILAS-Conference*, Berlin (2014).
5. „XUV coherence tomography with high harmonic generation light sources,“ *ATTO-Conference*, Montreal, Canada (2015).
6. „Extreme ultraviolet Coherence Tomography with nanoscale resolution,“ *Topical Problems of Biophotonics*, St. Petersburg, Russland, (2017) (invited).

Patente

1. M. Wünsche, S. Fuchs, G. Paulus, C. Rödel, „Verfahren und Vorrichtung zur Erzeugung von Laserlicht mit definierten Spektraleigenschaften,“ DE102014018511, (2016).
2. S. Fuchs, C. Rödel, G. G. Paulus, „Verfahren und Vorrichtung zur Bestimmung der ein- oder mehrdimensionalen Struktur von Objekten mittels Strahlung kurzer Wellenlänge,“ DE102014007106, (2014).

Begleitete Abschlussarbeiten

1. J. Biedermann, „Erzeugung hoher Harmonischer in Gasen mit few-cycle Laserpulsen,“ Bachelorarbeit (2013).
2. S. Aull, „Optimierung einer Harmonischen-Lichtquelle für die Kohärenztomographie im extremen ultravioletten Spektralbereich,“ Bachelorarbeit (2014).
3. J. Biedermann, „Laser-Driven XUV Coherence Tomography,“ Masterarbeit (2015).
4. J. J. Abel, „XUV Kohärenztomografie - Auf dem Weg zur dreidimensionalen Nanoskopie,“ Masterarbeit (2016).
5. A. Krause, „XUV Kohärenztomographie mit einer Referenzfolie,“ Bachelorarbeit (2017).
6. J. Reinhard, „XUV-Mikroskopie mit einem Schwarzschild-Objektiv,“ Masterarbeit (2018).

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich erkläre hiermit ehrenwörtlich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig, ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel und Literatur angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet. Bei der Auswahl und Auswertung folgenden Materials bzw. der Beisteuerung von Material/Daten haben mir die nachstehend aufgeführten Personen in der jeweils beschriebenen Weise unentgeltlich geholfen:

1. Dr. Uwe Hübner (Leibniz-Institut für Photonische Technologien Jena) hat die lateral strukturierten Proben herstellt.
2. Die Schnittbilder der lateral strukturierten Probe im Rasterelektronenmikroskop und im Transmissionselektronenmikroskop wurden von Prof. Dr. Carsten Ronning, Dr. Philipp Schöppe (Institut für Festkörperphysik, Universität Jena) und Hans-Jürgen Hempel (Otto Schott Institut für Materialwissenschaft, Universität Jena) aufgenommen.

Weitere Personen waren an der inhaltlich-materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder andere Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen. Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt. Die geltende Promotionsordnung der Physikalisch-Astronomischen Fakultät ist mir bekannt.

Ich versichere ehrenwörtlich, dass ich nach bestem Wissen die reine Wahrheit gesagt und nichts verschwiegen habe.

Jena, 17. Dezember 2018

Silvio Fuchs